



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**Creación de entrelazamiento cuántico
en procesos de dispersión
a bajas energías**

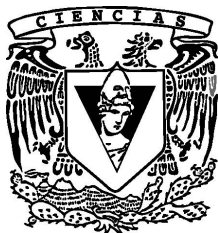
T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

P R E S E N T A :

Dario Gerardo Flores Luis



**DIRECTOR DE TESIS:
Dr. Ricardo Alberto Weder Zaninovich
México D.F. 2014**



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Indice

- Introducción 1
- Parte I
 - Preliminares
 - Espacios métricos y normados 13
 - Espacios de Hilbert 23
 - El espacio $L^2(\mathbb{R}^n)$ 39
 - Análisis de Fourier 51
 - Partículas libres 59
 - Estados y Observables 71
 - Funciones propias y valores propios 79
 - Operadores lineales en espacios de Hilbert 83
 - Postulados de la mecánica cuántica 95
 - Sistemas compuestos 101
 - Observables de un sistema binario 109
 - Estados puros y entrelazados 117
 - Teoría de dispersión 123
 - Teoría cuántica de la dispersión 125
 - Representaciones espectrales 137
 - Dispersión de dos partículas 143
 - Dispersión a bajas energías 147
- Parte II
 - Entrelazamiento cuántico en procesos de dispersión a bajas energías
 - Creación de entrelazamiento 159
- Parte III
 - Apéndice
 - Apéndice A, Introducción de \hbar y m en el teorema de Kato – Jensen 189
 - Apéndice B, Integrales elementales 195
 - Apéndice C, Cálculo de $L(\mu_1, 1-\mu_1)$ 197
 - Apéndice D, Cálculo de $N(\mu_1, 1-\mu_1)$ 201
 - Apéndice E, Cálculo de $J(1/2, 1/2)$ 203
 - Apéndice F, Calculo de $J(1,0)$ 209
- Parte IV
 - Referencias 213

Introducción

Este texto presenta un estudio detallado del artículo *Entanglement creation in low-energy scattering*, autoría del Dr. Ricardo Weder Saninovich, publicado en Diciembre de 2011 en la revista *Physical Review* [1].

El artículo en cuestión se centra en el estudio de la creación de entrelazamiento cuántico en procesos de dispersión a bajas energías. Como es bien sabido, la dispersión es proceso dinámico básico cuyo estudio es esencial en todas las áreas de la física, tanto clásica como moderna, mientras que el entrelazamiento cuántico es la noción central de las teorías cuánticas modernas, en particular es la base fundamental de la teorías de la información y de la computación cuántica, dos áreas de gran importancia para el futuro desarrollo tecnológico.

El entrelazamiento cuántico es un fenómeno que solo se da en sistemas compuestos (sistemas formados por dos o más subsistemas cuánticos), por ejemplo como los que son descritos en [13]. Cuando se habla de entrelazamiento cuántico o de un sistema compuesto cuánticamente entrelazado, nos referimos a un sistema en el que entre sus componentes (los subsistemas que lo forman) se han creado correlaciones como resultado de las interacciones dentro del sistema completo, haciendo que sea imposible dar una descripción del estado cuántico de cada uno de los subsistemas sin tomar en cuenta los estados de los demás. De esta forma cada subsistema deja de ser *cuánticamente independiente* incluso cuando la interacción entre los subsistemas halla cesado y estos hallan sido separados físicamente.

En este texto vamos a estudiar creación de entrelazamiento cuántico en un sistema compuesto por dos partículas sin spin, de masas m_1 y m_2 en el limite no relativista de bajas energías en tres dimensiones.

Para hacer esto, primero vamos a considerar que la interacción entre las partículas esta en función de la *posición relativa* entre ellas y que esta interacción se hace despreciable cuando la *separación entre las partículas es grande*. Vamos a comenzar suponiendo que a tiempos en el pasado remoto (esto es tiempos en el limite $t \rightarrow -\infty$) las partículas se encuentran muy alejadas una de la otra, haciendo que la interacción entre ellas sea despreciable y que por tanto las podamos considerar como sistemas cuánticos independientes, mas aun, en este punto podemos describir el estado cuántico de cada partícula a través de una solución apropiada de la ecuación libre de Schrödinger en tres dimensiones, de esta forma la dinámica del sistema completo esta dada por el producto de estos dos estados independientes. Después, el sistema evoluciona, las partículas se acercan, interactúan compartiendo información cuántica entre ellas provocando que se entrelacen cuánticamente, para después dispersarse y *alejarse*. Para tiempos en el futuro lejano (en el limite $t \rightarrow \infty$) la interacción entre las partículas vuelve a ser despreciable y la dinámica del sistema se puede describir por medio de una solución apropiada de la ecuación libre de Schrödinger en seis dimensiones, sin embargo en este punto al estar entrelazadas las partículas debido al proceso de dispersión, el estado del sistema completo ya no puede ser descrito por el producto de dos soluciones de la ecuación libre de Schrödinger en tres dimensiones. A este ultimo estado del sistema completo lo conocemos como el *estado asintótico final libre* y es en donde realizaremos la *medición del entrelazamiento* que se creó entre las partículas, a través de la pureza P del sistema. Debemos hacer notar que los procesos de dispersión son quizá la manera mas simple de entrelazar cuánticamente a un conjunto de partículas.

Desde la proposición de su existencia en 1935 ([2] y [3]) y aun después de su confirmación teórica en la década de los sesenta [4] y de su observación experimental en las décadas de los setenta y

ochenta ([5] y [6]), el entrelazamiento cuántico sigue siendo un tema controversial en la física y se puede debatir ampliamente acerca de su existencia o no. Sin embargo, este texto no pretende ser una discusión acerca de esta controversia. En este trabajo enfocamos al entrelazamiento cuántico como un objeto mas de estudio de la física matemática teórica, ya que como es bien sabido este efecto es hasta cierto punto teóricamente posible.

Este texto se divide principalmente en tres partes: **Preliminares, Creación de entrelazamiento y Apéndice.**

En la primera parte *Preliminares*, empezamos dando una *clásica* introducción a las herramientas y conceptos básicos que se utilizan en la física matemática. En el primer capítulo comenzamos desde las definiciones fundamentales de espacios métricos y la topología que se genera en estos, para después introducir a los espacios normados completos o de Banach. Para estos últimos espacios introducimos a los operadores lineales acotados y mostramos con todo detalle que el conjunto que forman estos es de nuevo un espacio de Banach, bajo la definición de una norma apropiada.

En el capítulo dos introducimos a los espacios con producto interno y estudiamos detalladamente como se puede generar una función norma a través de este producto, para después introducir a los espacios de Hilbert, los cuales son una clase de espacios de Banach. Los espacios de Hilbert tienen un papel fundamental en la mecánica cuántica ya que como se ve mas adelante en esta parte del texto, los estados cuánticos de un sistema se expresan en términos de funciones, las cuales son elementos de un espacio de Hilbert apropiado. En el resto de este capítulo nos dedicamos a estudiar las propiedades mas importantes de los espacios de Hilbert, a saber, centramos nuestra atención en lo que en muchos textos se refieren como *la geometría de los espacios de Hilbert* ya que el concepto de producto escalar y la norma que surge de este, permite hacer algunas analogías de carácter geométrico con los espacios euclidianos de dimensión finita (ya que los espacios de Hilbert pueden ser de dimensión infinita). Algunas de estas propiedades *geométricas* son el *Teorema de Pitágoras*, las desigualdades de Bessel y de Schwarz, la ley del paralelogramo, el teorema de proyección y el teorema de representación de Riez. Después continuamos el capítulo con un estudio detallado de las *Bases orto normales* en estos espacios, en donde establecemos que todo espacio de Hilbert tiene una base ortonormal, la cual puede llegar a ser un conjunto no numerable. Luego, introducimos a los *espacios de Hilbert separables*, los cuales son los que tienen una base ortonormal a lo mas numerable.

Con los conceptos anteriores establecidos, concluimos este capítulo con el estudio del producto tensorial de espacios de Hilbert, con lo cual mostramos que se puede generar un nuevo espacio de este tipo a través de del producto tensorial de los elementos de un conjunto de espacios de Hilbert. Esta parte de nuestro estudio de los espacios de Hilbert es de vital importancia, ya que mas adelante en el texto veremos que el espacio donde se encuentran las funciones que describen los estados cuánticos de un sistema formado por dos o mas partículas, resulta ser el producto tensorial de los espacios de Hilbert donde se encuentran los estados individuales de cada partícula.

En el capítulo tres nos dedicamos a desarrollar un ejemplo concreto de un espacio de Hilbert, a saber el espacio $L^2(\mathbb{R}^n)$. El estudio de este espacio es importante ya que los estados cuánticos con los que trabajaremos se encuentran en los espacios $L^2(\mathbb{R}^3)$ y $L^2(\mathbb{R}^6)$. Comenzamos este capítulo considerando al conjunto $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ el cual esta formado por todas las funciones de \mathbb{R}^n a \mathbb{C} , las cuales tienen la propiedad de que su modulo al cuadrado es integrable en el sentido de Lebesgue; es bien sabido que este conjunto resulta ser un espacio vectorial sobre \mathbb{C} . Después introducimos a la función

$(\cdot, \cdot) : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n) \times \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}$, dada por:

$$(f, g) = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) \overline{g(\mathbf{x})} d\mathbf{x}$$

esta función se presta como candidata a ser un producto interno en el espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$, sin embargo esta falla en ser *positiva definida*. Para corregir esto mostramos detalladamente como generar un espacio de clases de equivalencia de funciones, identificando a las funciones de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ que son *iguales en casi todo punto* en el sentido de la medida de Lebesgue. Después definimos al espacio $L^2(\mathbb{R}^n)$ como este espacio de clases de equivalencia y vemos con todo detalle que la función:

$$([f], [g]) = (f, g) = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) \overline{g(\mathbf{x})} d\mathbf{x}$$

en donde $f, g \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ son los representantes de las clases de equivalencia $[f]$ y $[g]$ respectivamente, resulta ser un producto interno de donde obtenemos inmediatamente la definición de una función norma. En el resto de este capítulo nos dedicamos a mostrar detalladamente que el espacio $L^2(\mathbb{R}^n)$ es completo bajo la norma generada por el producto interno y por tanto es en efecto un espacio de Hilbert. Así también, mostramos que $L^2(\mathbb{R}^n)$ es de hecho un espacio separable y que por tanto podemos encontrar una base ortonormal numerable para este.

En la práctica se suele tratar al espacio $L^2(\mathbb{R}^n)$ como un espacio de funciones aunque formalmente es un espacio de Hilbert de clases de equivalencia. Sin embargo no hay ninguna ambigüedad en hacer esto ya que como hemos mencionado el producto escalar de dos clases de equivalencia se da en términos de dos representantes de estas, las cuales resultan ser funciones y ya que las demás propiedades que hacen de $L^2(\mathbb{R}^n)$ un espacio de Hilbert dependen de la definición del producto escalar, podemos *moderar* nuestra visión de este espacio y trabajar con el como si se tratara de un espacio vectorial de dimensión infinita cuyos elementos son funciones.

El capítulo cuatro se dedica al estudio de las herramientas básicas del análisis de Fourier que se utilizan ampliamente en la mecánica cuántica. Comenzamos definiendo las *sumas de Fourier* complejas para después introducir a las series de Fourier de funciones complejas de cuadrado integrable en intervalos de longitud finita $[-L, L]$. Después consideramos el caso límite en donde el intervalo $[-L, L]$ tiende a la recta real $(-\infty, \infty)$; haciendo esto vemos como las sumas involucradas en la serie de Fourier de una función suave se pueden comenzar a aproximar a través de integrales, con lo cual llegamos a la definición de la *transformada de Fourier* de una función suave, para después extender este concepto a funciones de cuadrado integrable. Una vez establecido lo anterior, damos la definición de la transformada de Fourier para funciones complejas suaves con dominio en \mathbb{R}^n . Es aquí en donde introducimos al *espacio de momentos* y establecemos el teorema de inversión de Fourier. A través del lema de *Riemann - Lebesgue* y del teorema de *Fourier - Plancherel* establecemos algunas de las propiedades más importantes de la transformada de Fourier que son de vital importancia en la teoría cuántica. Concluimos este capítulo con la extensión de la transformada de Fourier al espacio $L^2(\mathbb{R}^n)$, el cual es el verdadero espacio en donde utilizaremos la teoría desarrollada en este capítulo.

Es en el capítulo cinco en donde con toda la teoría matemática establecida hasta este punto, en donde comenzamos con la introducción a la teoría cuántica. Este capítulo comienza con una discusión acerca de la dualidad onda - partícula. Para hacer esto lo más claro posible esta discusión la llevamos a cabo sobre el marco histórico del nacimiento de la mecánica cuántica, comenzando con un breve repaso acerca de los conceptos de onda y los fenómenos ondulatorios, para después discutir el efecto foto eléctrico y como la explicación que se dio de este en el año de 1905, se dio en términos de una nueva *visión* acerca de la naturaleza de los fenómenos ondulatorios, tales como la propagación de las ondas electromagnéticas. Después discutimos las *ondas de materia* propuestas por Louis de

Broglie propuestas en 1924. Aquí es donde discutimos por primera vez la dualidad onda partícula y como a un fenómeno corpuscular como la propagación de un haz de electrones se le puede asociar un fenómeno ondulatorio y hacemos notar que esta propuesta es el recíproco de la explicación del efecto fotoeléctrico. Después describimos el experimento de Davison y Germer, el cual da la confirmación experimental de las ondas de materia propuestas por Louis de Broglie. Luego, considerando ondas planas de la forma $u(\mathbf{x}, t) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t)$ (con $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$), establecemos la **ecuación libre de Schödinger** simplemente como una ecuación diferencial cuyas soluciones pueden ser dadas en términos de las ondas planas $u(\mathbf{x}, t)$. En el resto del capítulo introducimos los paquetes de ondas planas y discutimos la linealidad de la ecuación de Schödinger e introducimos la *distribución de momento* de una función de onda a través de su transformada de Fourier. El capítulo concluye con la interpretación física de la función de onda, a la cual interpretamos como la función cuyo módulo cuadrado da la *densidad de probabilidad* de encontrar a la partícula que esta describe en un cierto punto del espacio. Así también discutimos la *condición de normalización* que deben de cumplir estas funciones para que su interpretación probabilística quede establecida sin ambigüedad y establecemos como calcular la probabilidad de encontrar a una partícula en cierta región del espacio a un cierto tiempo.

El capítulo seis comienza con una discusión de lo que es el estado de un sistema en general para la física. Hacemos notar que el estado de un sistema físico debe de ser una colección de propiedades que sean capaces de dar una descripción completa del sistema, en el sentido de que con esta información se pueda determinar el estado de este a todo tiempo, tanto en el pasado como en el futuro. También hacemos notar que el desarrollo de un sistema en el tiempo esta dado por una ley dinámica; en la mecánica clásica esta ley dinámica esta dada por las ecuaciones de Hamilton, mientras que en la mecánica cuántica esta dada por la ecuación de Schödinger cuyas soluciones van a resultar ser funciones que contienen toda la información necesaria de un sistema cuántico para determinar su estado a todo tiempo.

Después en este capítulo introducimos el concepto de *Observable*. Un observable es una cantidad física como la posición, el momento y la energía, la cual se puede medir experimentalmente. Luego introducimos a los operadores de posición y de momento con los cuales podemos extraer información acerca de estas dos cantidades de las funciones que describen el estado de un sistema cuántico. Así también, ya que lo anterior solo se da en términos de probabilidades definimos los *valores esperados* o valores medios de un observable físico. Luego introducimos la regla de sustitución como una herramienta para obtener observables de estados cuánticos. Es aquí en donde introducimos al Hamiltoniano cuántico:

$$H = -\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{x})$$

el cual resulta ser el observable de la energía total de un sistema cuántico.

En el capítulo siete, damos la definición de *función propia y valor propio* para operadores lineales en espacios de Hilbert. Así también damos la relación que existe entre los observables físicos y los operadores lineales, definimos a los *estados propios* y discutimos como obtener los valores esperados de los observables descritos por operadores lineales. Luego, prestamos atención a las funciones propias del Hamiltoniano cuántico, para establecer a la ecuación de Schödinger estacionaria y al problema de valores iniciales que esta implica, para después analizar la evolución temporal de estas funciones propias, a las cuales definimos como *estados estacionarios* del sistema cuántico que describen.

En el capítulo ocho nos dedicamos a estudiar a los operadores lineales en espacios de Hilbert y a formalizar algunos de los conceptos introducidos en el capítulo anterior. Comenzamos estableciendo

la **ecuación general de Schödinger** dependiente del tiempo:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H \psi(t)$$

en donde H es Hamiltoniano cuántico. Definimos a los operadores unitarios $U : H \rightarrow H$, los cuales son operadores lineales acotados con la característica de que preservan la norma del elemento del espacio de Hilbert al que son aplicados:

$$\|U\psi\| = \|\psi\|, \forall \psi \in H$$

En esta parte hacemos notar que la transformada de Fourier es de hecho un operador unitario en el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Luego, discutimos la evolución temporal de las soluciones de la ecuación general de Schödinger dependiente del tiempo en términos de operadores unitarios. Para esto definimos el *generador infinitesimal* para operadores de este tipo y damos la definición de los *grupos unitarios de un parámetro*.

Después definimos a los operadores simétricos en espacios de Hilbert y estudiamos sus propiedades mas importantes, para después dar la definición del adjunto de un operador. Con lo anterior establecido damos la definición de los operadores *auto adjuntos* y enunciamos el teorema de Stone, con lo que concluimos nuestra discusión de la evolución temporal de los estados cuánticos. Terminamos este capítulo con la definición formal de un **Observable físico** en el sentido de la mecánica cuántica. Un observable es un operador auto adjunto cuyo conjunto de funciones propias forma una base ortonormal del espacio de Hilbert en donde este actúa.

En los capítulos anteriores nos hemos dedicado a estudiar algunos de los aspectos matemáticos mas importantes que dan forma y solides a la teoría cuántica, sin profundizar demasiado en el sentido físico que estos tienen. En el capítulo nueve nos dedicaremos a crear la conexión entre los aspectos matemáticos mas abstractos de la teoría cuántica, con lo que en verdad se puede apreciar en el mundo real por medio de mediciones y experimentos. Esta conexión queda establecida a través de los seis postulados de la mecánica cuántica. En estos se postula que a todo tiempo el estado de un sistema cuántico queda determinado por un elemento de un espacio de Hilbert apropiado (en nuestro caso en los espacios $L^2(\mathbb{R}^n)$), que en un sistema cuántico las cantidades físicas son descritas por operadores auto adjuntos que actúan en el espacio de Hilbert del sistema en cuestión y que los únicos resultados posibles de las mediciones de estas cantidades son los valores propios de los operadores auto adjuntos. Así también postulamos el *Principio de descomposición espectral*, la *Reducción de paquete de ondas* de un estado cuántico después de una medición y postulamos finalmente a la ecuación general de Schödinger dependiente del tiempo como la ley dinámica de los sistemas cuánticos.

Hasta este punto todo lo que se ha discutido acerca de la teoría cuántica (con excepción de los seis postulados) es valido para sistemas formados por una sola partícula. En los capítulos diez, once y doce nos dedicamos principalmente a generalizar los conceptos desarrollados en los capítulos anteriores para sistemas compuestos, en el caso particular de sistemas cuánticos formados por dos partículas (sistemas binarios). Comenzamos estableciendo que el espacio de Hilbert de un sistema binario es el producto tensorial de los correspondientes espacios de Hilbert de las dos partículas que lo forman. Establecemos la ecuación general de Schödinger dependiente del tiempo, para este tipo de sistemas. Así también introducimos el producto tensorial de operadores lineales para definir el concepto de observable para sistemas binarios.

Luego nos dedicamos a la definición del *operador de densidad* y sus principales propiedades. Al mismo tiempo introducimos las nociones de *entrelazamiento cuántico* y algunos conceptos del análisis funcionas como los operadores de traza finita para después estudiar como a través del operador de densidad podemos obtener información acerca de los subsistemas que forman al sistema binario. Es

en el capítulo doce en donde nos dedicamos al estudio de los estados puros y entrelazados. Aquí definimos la *forma normal* del vector de estado del sistema binario a través de la forma canónica del operador de densidad. Concluimos este capítulo con la definición de la pureza del estado de un sistema binario. La pureza P es una medida del entrelazamiento que existe en el estado de un sistema compuesto. Mostramos que la Pureza P es igual a uno, si y solo si, el estado del sistema es no entrelazado y que es estrictamente menor que uno en cualquier otro caso. En este capítulo concluimos la parte de la introducción que tiene que ver con los conceptos básicos de la mecánica cuántica que utilizaremos en el resto del texto.

En el capítulo comenzamos nuestra discusión acerca de la teoría de dispersión. En este capítulo abordamos de manera breve pero general, las características fundamentales de los sistemas físicos de dispersión. Discutimos como la dispersión en sistemas de muchas partículas se modela a través de la interacción que existe entre estas y por medio de *estados libres* tanto el pasado remoto como en el futuro distante, considerando que a estos tiempos la separación de las partículas es tan grande que la interacción entre estas es despreciable; es aquí en donde obtenemos la primera de la *Hipótesis asintótica* sobre la cual desarrollaremos los conceptos de dispersión en el sentido de la mecánica cuántica.

Es en el capítulo catorce en donde comenzamos nuestra discusión acerca de la teoría cuántica de la dispersión dependiente del tiempo. Comenzamos formulando la condición asintótica en términos de la mecánica cuántica a través de estados cuánticos libres y estados cuánticos perturbados. Es aquí en donde definimos a los operadores de onda Ω_{\pm} y establecemos algunas de sus propiedades más importantes para después poder introducir al operador de dispersión sin ninguna ambigüedad; vemos que los operadores de onda son *isometrías parciales* y vemos que la inversa de estos operadores está dada por el adjunto de cada uno de estos, respectivamente. Luego definimos al operador de dispersión $\mathcal{S} = \Omega_{+}^{*}\Omega_{-}$ y vemos con todo detalle que este es también una isometría parcial.

En el capítulo quince retomamos el estudio de conceptos del análisis funcional. Aquí estudiamos las *representaciones espectrales* de espacios de Hilbert a través de funciones medibles del tipo $f : \lambda \subset \mathbb{R} \rightarrow H$, en donde λ es un subconjunto medible (en el sentido de Lebesgue) y H es un espacio de Hilbert arbitrario. Vemos con todo detalle como el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$ se puede descomponer en el espacio de funciones del tipo $f : [0, \infty) \rightarrow L^2(S^2)$ en donde $L^2(S^2)$ es el espacio de todas las funciones de cuadrado integrable sobre la esfera unitaria del espacio \mathbb{R}^3 . Hacemos esto con el objetivo de llegar a la descomposición espectral del operador de dispersión \mathcal{S} . La descomposición espectral de este operador se puede ver como $\{\mathcal{S}(\lambda)\}_{\lambda \geq 0}$ en donde $\mathcal{S}(\lambda)$ es un operador auto adjunto, unitario y parcialmente isométrico del espacio $L^2(S^2)$, para cada $\lambda \geq 0$. A esta representación del operador \mathcal{S} , se conoce como la *matriz de dispersión*.

La teoría cuántica de dispersión desarrollada en el capítulo catorce se puede aplicar de forma directa a un sistema cuántico de una sola partícula, la cual es dispersada por un potencial $V(\mathbf{x})$. En el capítulo dieciséis mostramos como el problema de la dispersión de un sistema cuántico formado por dos partículas, las cuales interactúan entre ellas, puede ser reducido al problema de la dispersión de una sola partícula, como en el capítulo catorce, simplemente haciendo el cambio de coordenadas al sistema de referencia del centro de masa de las partículas, tal y como se hace en la teoría clásica de campo central. Aquí cambiamos la factorización del espacio de Hilbert del sistema de dos partículas $H_1 \otimes H_2$ por una factorización en términos del espacio de Hilbert del centro de masa del sistema y de la variable de posición relativa $H_{CM} \otimes H_{rel}$.

En el capítulo diecisiete planteamos las condiciones del problema específico que vamos a abordar

en el resto del texto. Como ya hemos mencionado vamos a estudiar la creación de entrelazamiento cuántica en un proceso de dispersión de dos partículas sin spin, de masas m_1 y m_2 respectivamente. En este caso el espacio de configuración del sistema es $H = L^2(\mathbb{R}^6)$ el cual se puede factorizar como $H = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$. Vamos a considerar la ecuación de Schrödinger para un sistema de dos partículas en *unidades físicas*:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = - \left(\frac{1}{2m_1} \Delta_1 + \frac{1}{2m_2} \Delta_2 \right) \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) + V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \psi$$

en donde el potencial V depende de del vector de posición relativo de las dos partículas $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$. Aquí cambiamos al sistema de coordenadas del centro de masa de las dos partículas y realizamos la factorización del espacio de Hilbert $H = H_{CM} \otimes H_{rel} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}^6)$. Luego realizamos la factorización del operador de dispersión $\mathcal{S} = I_{cm} \otimes \mathcal{S}_{rel}$, en donde I_{cm} es el operador identidad del espacio de Hilbert del centro de masa $H_{CM} = L^2(\mathbb{R}^3)$ y \mathcal{S}_{rel} es el operador de dispersión actuando sobre el espacio de Hilbert de la coordenada relativa $H_{rel} = L^2(\mathbb{R}^3)$. Luego pasamos al espacio de momentos Haciendo que el espacio de configuración se factorize ahora en el espacio de Hilbert del momento del centro de masa del sistema y del momento relativo de las partículas $\hat{H} = \hat{H}_{CM} \otimes \hat{H}_{rel}$. En el espacio de momentos definimos al operador de dispersión como:

$$\hat{\mathcal{S}} = I_{CM} \otimes \hat{\mathcal{S}}_{rel} = I_{CM} \otimes \mathcal{F} \mathcal{S}_{rel} \mathcal{F}^{-1}$$

en donde \mathcal{F} y \mathcal{F}^{-1} denotan a la transformada de Fourier y a su inversa actuando en el espacio de Hilbert $\hat{H}_{rel} = L^2(\mathbb{R}^3)$. En este espacio y en unidades físicas, la matriz de dispersión tiene toma la forma:

$$\hat{\mathcal{S}}_{rel} = \{\mathcal{S}(\mathbf{p}/2\mu)\}$$

con \mathbf{p} el momento relativo y μ la masa reducida del sistema. Después ya que estamos interesados en el caso de dispersión en el límite de bajas energías (esto es, en el límite cuando $\mathbf{p}/\hbar \rightarrow 0$) enunciamos el teorema del *Kato-Jensen*[18] el cual da una expansión de la matriz de dispersión en este limite, en términos de operadores de rango finito:

$$\mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2m) = I + i|\mathbf{p}/\hbar|\Sigma_1^0 - |\mathbf{p}/\hbar|^2\Sigma_2^0 + \mathcal{O}$$

Si $\varphi(\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p}) \in L^2(\mathbb{R}^6)$ es un estado puro de un sistema de dos partículas, su pureza esta dada por:

$$P(\varphi) = \int_{\mathbb{R}^{12}} \varphi(\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p}) \varphi(\mathbf{p}'_{cm}, \mathbf{p}') \overline{\varphi(\mathbf{p}'_{cm}, \mathbf{p})} \overline{\varphi(\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p}')} d\mathbf{p}_{cm} \mathbf{p} \mathbf{p}'_{cm} \mathbf{p}'$$

En la segunda parte del texto, basándonos en la expansión de la matriz de dispersión del teorema de Kato - Jensen, derivamos una expresión para la pureza con cota de error para la dispersión de dos partículas sin spin, cuyo potencial de interacción no tiene necesariamente simetría esférica, como suele suponerse en muchos casos de estudio de dispersión. A saber, nuestra suposición sobre el potencial $V(\mathbf{x})$ (con $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ la coordenada relativa de las partículas), esta dada por:

Condición sobre el potencial de interacción $V(\mathbf{x})$: Para alguna $\beta > 0$, $(1 + |\mathbf{x}|)^\beta V(\mathbf{x})$ es un operador compacto del espacio de Sobolev H^1 al espacio de Sobolev H^{-1} .

†

Para hacer esto, comenzamos suponiendo que los estados asintóticos iniciales de las dos partículas están dados por un par de funciones Gaussianas normalizadas, con la misma varianza pero con momento promedio opuesto:

$$\varphi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_1) = \frac{1}{(\sigma^2\pi)^{3/4}} \exp(-(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0)^2/2\sigma^2) ; \varphi_{-\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_2) = \frac{1}{(\sigma^2\pi)^{3/4}} \exp(-(\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_0)^2/2\sigma^2)$$

de esta forma, el estado asintótico inicial del sistema esta dado por:

$$\varphi_{in,\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \varphi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_1) \varphi_{-\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_2)$$

Suponemos que el proceso de dispersión se lleve a cabo en el origen al tiempo $t = 0$ y por esta razón la posición promedio de las dos partículas es cero en el estado asintótico inicial $\mathcal{F}^{-1} \varphi_{in,\mathbf{p}_0}$. Una vez que el proceso de dispersión termina, el estado de las partículas queda determinado por el estado asintótico final $\varphi_{out,\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = [\mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in,\mathbf{p}_0}](\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$. Después nos dedicamos a calcular la pureza del estado final $P(\varphi_{out,\mathbf{p}_0})$ para comprobar la creación de entrelazamiento entre las partículas debido al proceso de dispersión por el que han pasado. Sin embargo notamos que este estado final debe de ser entrelazado, ya que esta dado en términos de la matriz de dispersión la cual depende directamente del momento relativo \mathbf{p} del sistema.

Debemos mencionara que para estar en el limite de bajas energías, necesitamos que el momento relativo promedio \mathbf{p}_0 sea pequeño, pero también necesitamos que la varianza σ de los estados Gaussianos iniciales también sea pequeña, ya que de lo contrario el estado asintótico inicial $\varphi_{in,\mathbf{p}_0}$ tendría una gran probabilidad de tener un momento grande, incluso si \mathbf{p}_0 tiene un valor pequeño.

Denotamos por φ_{in} al estado asintótico inicial con momento relativo promedio $\mathbf{p}_0 = 0$, y de notamos $\varphi_{out} = \mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}$, al esta asintótico de salida correspondiente. Así también definimos:

$$\mu_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \quad ; \quad \mu_2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2}$$

a las fracciones de la masa de las partículas uno y dos con respecto a la masa total.

En los teoremas 18.3 y 18.5 damos una demostración rigurosa de los siguientes resultados acerca de los términos de orden dominante de la pureza del estado final asintótico $\varphi_{out,\mathbf{p}_0}$, en el límite de bajas energías:

$$P(\varphi_{out,\mathbf{p}_0}) = P(\varphi_{out}) + O(|\mathbf{p}_0/\hbar|) \quad ; \quad , \text{cuando } |\mathbf{p}_0/\hbar| \rightarrow 0$$

en donde $O(|\mathbf{p}_0/\hbar|)$ es uniforme con respecto a σ , para σ en conjuntos acotados. Más aun:

$$\mathbf{p}(\varphi_{out}) = 1 - \left(\frac{c_0 \sigma}{\hbar}\right)^2 \mathcal{E}(\mu_1) + \begin{cases} o(|\sigma/\hbar|^2) & \text{si } \beta > 5 \\ O(|\sigma/\hbar|^3) & \text{si } \beta > 7 \end{cases}$$

en donde β es la misma constante que aparece en la suposición del potencial de interacción, la cual controla como decae este en el infinito. c_0 es la *longitud de dispersión* la cual se define en la ecuación (17.17). $\mathcal{E}(\mu_1)$ es el *coeficiente de entrelazamiento*, el cual esta dado por:

$$\mathcal{E}(\mu_1) = \frac{16}{\pi[1 + (2\mu_1 - 1)^2]} + \frac{4}{(2\mu_1 - 1)^2} \cdot \frac{[1 + (2\mu_1 - 1)^2]^{3/2} - 1}{\sqrt{1 + (2\mu_1 - 1)^2}} \\ - 8J(\mu_1, 1 - \mu_1) - 8J(1 - \mu_1, \mu_1)$$

con:

$$J(\mu_1, \mu_2) =$$

$$\frac{1}{\pi^{9/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \exp \left[-\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{2} |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^2 - |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 - \frac{|\mathbf{q}_1|^2}{2} \right] \right. \\ \left. \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|} d\mathbf{q}_1 \right]^2 d\mathbf{q}_2$$

Observamos que $\mathcal{E}(\mu_1) = \mathcal{E}(1 - \mu_1)$, ya que $P(\varphi_{out})$ debe de ser invariante bajo el intercambio de las partículas uno y dos. También observamos que no hay ningún término de orden $\frac{\sigma}{\hbar}$ en la expresión de $P(\varphi_{out})$.

La tercera parte del texto es un apéndice en donde a través de cálculos explícitos se establecen algunas ecuaciones que se utilizan en el capítulo de creación de entrelazamiento. También calculamos explícitamente el valor de $J(1/2, 1/2)$ y de $J(1, 0)$. Así también, es en este apéndice en donde damos una generalización del teorema de Kato - Jensen ya que este originalmente se enuncia para partículas de masa $1/2$ en unidades en las que $\hbar = 1$.

Parte I
Preliminares

Capítulo 1

Espacios métricos y normados

El ejemplo más sencillo y natural de un espacio vectorial es sin duda \mathbb{R}^n , en donde es fácil e intuitivo el desarrollar conceptos geométricos tales como la norma de un vector, el producto escalar y la distancia entre puntos, de donde obtenemos las importantes nociones de límite, convergencia y continuidad. Sin embargo, estos conceptos no son únicos de \mathbb{R}^n ya que es posible desarrollarlos sobre conjuntos y espacios vectoriales más generales, incluso de dimensión infinita. En este capítulo comenzaremos estudiando las nociones de distancia y norma, en conjuntos y espacios vectoriales en general, mediante la introducción de los espacios métricos y los espacios normados.

Definición 1.1. *Un espacio métrico es un conjunto M y una función real $d(\cdot, \cdot)$ sobre $M \times M$ que satisface:*

1. $d(x, y) \geq 0$.
2. $d(x, y) = 0$, si y solo si, $x = y$.
3. $d(x, y) = d(y, x)$.
4. $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$ (desigualdad del triángulo).

En donde a la función $d(\cdot, \cdot)$ se le conoce como la métrica de M .

Hay que notar que un espacio métrico es un conjunto M junto con una función d . En general, un conjunto X se puede convertir en un espacio métrico de diferentes maneras, empleado diferentes métricas. Cuando no sea del todo claro con que métrica estamos trabajando en un cierto espacio métrico M usaremos la notación $\langle M, d \rangle$ la cual muestra explícitamente a la métrica.

Ahora introducimos el importante concepto de convergencia en espacios métricos.

Definición 1.2. *Se dice que una sucesión de elementos $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ de un espacio métrico $\langle M, d \rangle$ converge a un elemento $x \in M$, si $d(x, x_n) \rightarrow 0$, cuando $n \rightarrow \infty$. Este hecho lo denotamos por,*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x$$

Un tipo muy importante de sucesiones en espacios métricos son las sucesiones de Cauchy.

Definición 1.3. *Una sucesión de elementos $\{x_n\}$ de un espacio métrico $\langle M, d \rangle$ es llamada una sucesión de Cauchy, si para todo $\epsilon > 0$, existe $N \in \mathbb{N}$, tal que si, $n, m \geq N$ ($n, m \in \mathbb{N}$) entonces, $d(x_n, x_m) < \epsilon$.*

Proposición 1.4. *Toda sucesión convergente es una sucesión de Cauchy.*

Demostración

Sea $\{x_n\}$ una sucesión de elementos de un espacio métrico $\langle M, d \rangle$ tal que, converge a $x \in M$, entonces, dada $\epsilon > 0$, podemos encontrar un $N \in \mathbb{N}$ tal que si, $n \geq N$ entonces $d(x_n, x) < \frac{\epsilon}{2}$. Luego si $m, n > N$, tenemos que,

$$d(x_n, x_m) \leq d(x_n, x) + d(x_m, x) < \epsilon$$

Por tanto, $\{x_n\}$ es una sucesión de Cauchy. □

Aunque toda sucesión convergente es una sucesión de Cauchy, el regreso de esta proposición no es necesariamente cierto para todo espacio métrico, como veremos a continuación. Sea \mathbb{Q} el conjunto de los números racionales con la métrica $d(x, y) = |x - y|$ y sea x^* un número irracional, es decir, $x^* \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$. Luego, existe una sucesión de racionales $\{x_n\}$ tal que, $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x^*$ en \mathbb{R} . Entonces $\{x_n\}$ es una sucesión de Cauchy de números en \mathbb{Q} que no converge a ningún $y \in \mathbb{Q}$, ya que de suceder esto se tendría que, $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = y$ en \mathbb{Q} y $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x^*$ en \mathbb{R} teniendo como consecuencia $x^* = y$. El ejemplo anterior motiva la introducción de un tipo especial de espacios métricos en donde toda sucesión de Cauchy es convergente.

Definición 1.5. *Un espacio métrico en el que todas las sucesiones de Cauchy convergen es llamado **espacio métrico completo**.*

El ejemplo mas simple de un espacio métrico completo es \mathbb{R}^n (para una demostración rigurosa de este hecho nos referimos a *ref Rudin*). Del hecho de que \mathbb{R} es un espacio métrico completo, es fácil ver que \mathbb{C} también lo es.

Definición 1.6. *Un conjunto B en un espacio métrico M es llamado **Denso** si cada $m \in M$ es un límite de elementos de B .*

Por ejemplo \mathbb{R} es un espacio métrico completo mientras que \mathbb{Q} no lo es. Este ejemplo de \mathbb{Q} y \mathbb{R} sugiere lo que se debe de hacer en un espacio métrico incompleto X para hacerlo completo. Es necesario agrandar a X agregando todos los límites posibles de todas las sucesiones de Cauchy, así el espacio original X va a ser un conjunto denso dentro de un espacio métrico completo más grande \tilde{X} . Esto es posible hacerlo siempre que, el espacio métrico incompleto se encuentre contenido en un espacio métrico completo más grande (como con \mathbb{Q} y \mathbb{R}) en el caso de que esto no suceda, no es claro que significa *el agregar todos los posibles límites*. El que sea posible completar todo espacio métrico es el contenido de un teorema para el cual primero necesitamos establecer las siguientes definiciones:

Definición 1.7. *Una función de un espacio métrico $\langle X, d \rangle$ a otro espacio métrico $\langle Y, \rho \rangle$ es llamada **continua** en $x \in X$ si, $\rho(f(x_n), f(x)) \rightarrow 0$, siempre que, $d(x_n, x) \rightarrow 0$ cuando $n \rightarrow \infty$.*

Definición 1.8. *Una biyección h de $\langle X, d \rangle$ a $\langle Y, \rho \rangle$ que preserva la métrica,*

$$\rho(h(x), h(y)) = d(x, y)$$

*es llamada una **isometría** la cual es automáticamente continua. Los espacios $\langle X, d \rangle$ y $\langle Y, \rho \rangle$ son llamados **isométricos** si existe una isometría entre ellos.*

Los espacios isométricos son esencialmente idénticos como espacios métricos; cualquier teorema que solo tenga que ver con la estructura métrica de $\langle X, d \rangle$ se va a cumplir en todos los espacios isométricos a este.

El siguiente teorema establece en que sentido un espacio métrico incompleto puede ser agrandado a un espacio métrico completo.

Teorema 1.9. Si $\langle M, d \rangle$ es un espacio métrico incompleto, es posible encontrar un espacio métrico completo \tilde{M} , tal que, M es isométrico a un subconjunto denso de \tilde{M} .

Demostración (generalidades)

Consideremos a todas las sucesiones de Cauchy $\{x_n\}$ de M . Digamos que dos sucesiones $\{x_n\}, \{y_n\}$ son equivalentes, si y solo si, $\lim_{n \rightarrow \infty} d(x_n, y_n) = 0$. Sea \tilde{M} la familia de clases de equivalencia de las sucesiones de Cauchy bajo la relación de equivalencia anterior. Luego, para cualquiera dos sucesiones de Cauchy el limite $\lim_{n \rightarrow \infty} d(x_n, y_n)$ existe y depende solo de la clase de equivalencia de $\{x_n\}$ y $\{y_n\}$. Este limite define una métrica en \tilde{M} , luego \tilde{M} es completo ya que toda sucesión de Cauchy $\{\xi_n\} \subset \tilde{M}$, en donde $\xi_n = [\{x_{j,n}\}_{j=1}^{\infty}]$, tiene como limite a la clase de equivalencia $\xi = [\{x_{j,j}\}_{j=1}^{\infty}]$. Finalmente mapeamos a M sobre \tilde{M} asociando a cada $x \in M$ con la sucesión constante $\{x\} \in \tilde{M}$. Luego M es denso en \tilde{M} y el mapeo es isométrico. □

Para completar esta discusión sobre espacios métricos, introduciremos las nociones de conjuntos abiertos y cerrados.

Definición 1.10. Sea $\langle X, d \rangle$ un espacio métrico:

1. Un conjunto de la forma $\{x \in X | d(x, y) < r\}$ es llamado una **una bola abierta**, $B(y; r)$, de radio r alrededor del punto y .
2. Un conjunto $O \subset X$ es llamado **abierto**, si $\forall y \in O$, existe un $r > 0$ tal que, $B(y; r) \subset O$.
3. Un conjunto $N \subset X$ es llamado una **vecindad** de $y \in N$ si existe una bola $B(y; r) \subset N$ para algún $r > 0$.
4. Sea $E \subset X$. Un punto $x \in X$ es llamado un **punto limite** de E , si $\forall r > 0$, $B(x; r) \cap (E \setminus \{x\}) \neq \emptyset$, esto es, x es un punto limite de E si este conjunto contiene otros puntos diferentes de x arbitrariamente cerca de x .
5. Un conjunto $F \subset X$ es llamado **cerrado** si F contiene a todos sus puntos limite.
6. Si $G \subset X$, $x \in G$ es llamado **punto interior** de G , si existe $r > 0$, tal que, $B(x; r) \subset G$.

Los resultados que se establecen en el siguientes dos teoremas son consecuencia inmediata de los resultados anteriormente mencionados (ver [8]).

Teorema 1.11. Sea $\langle X, d \rangle$ un espacio métrico, entonces:

1. Un conjunto O es abierto, si y solo si, $X \setminus O$ es cerrado.
2. $\lim_{m \rightarrow \infty} x_m = x$, si y solo si, para toda vecindad N de x existe un $M \in \mathbb{N}$, tal que, $m \geq M$ implica, $x_m \in N$.
3. El conjunto de puntos interiores de un conjunto es abierto.
4. La unión de un conjunto E con el conjunto de sus puntos limite, es un conjunto cerrado, denotado por \overline{E} y es llamado la **cerradura** de E .
5. Un conjunto es abierto, si y solo si, es una vecindad de cada uno de sus puntos.

Teorema 1.12. *Una función $f(\cdot)$ de un espacio métrico X a otro espacio métrico Y es continua, si y solo si, para todo conjunto abierto $O \subset Y$, la imagen inversa $f^{-1}[O]$ es un conjunto abierto.*

Completamos este capítulo con una discusión acerca de dos conceptos centrales del análisis funcional, los espacios normados y las transformaciones lineales acotadas.

Definición 1.13. *Un espacio normado es un espacio vectorial, V sobre \mathbb{C} (o \mathbb{R}) y una función $\|\cdot\|$, de V a \mathbb{R} que satisface:*

1. $\|v\| \geq 0$ para todo $v \in V$.
2. $\|v\| = 0$, si y solo si, $v = 0$.
3. $\|\alpha v\| = |\alpha| \|v\|$, para todo $v \in V$ y $\alpha \in \mathbb{C}$ (o en \mathbb{R}).
4. $\|v + w\| \leq \|v\| + \|w\|$, para toda v y w en V .

La desigualdad del triángulo implica de forma inmediata a la **desigualdad del triángulo inversa**:

$$\left| \|u\| - \|v\| \right| \leq \|u - v\|$$

Definición 1.14. *Una transformación lineal acotada u operador lineal acotado, de un espacio normado $\langle V_1, \|\cdot\|_1 \rangle$ a otro espacio normado $\langle V_2, \|\cdot\|_2 \rangle$, es una función, T , de V_1 a V_2 , que satisface:*

1. $T(\alpha v + \beta w) = \alpha T(v) + \beta T(w)$, $\forall v, w \in V_1$, $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$ o \mathbb{R} .
2. Para algún $C \geq 0$, $\|T(v)\|_2 \leq C \|v\|_1$.

Al conjunto de todas las transformaciones lineales acotadas, entre los espacios normados $\langle V_1, \|\cdot\|_1 \rangle$ y $\langle V_2, \|\cdot\|_2 \rangle$, lo denotamos como $B(V_1, V_2)$.

La constante C mas pequeña que satisface la segunda condición de la definición anterior, es conocida como la *norma* de T y la denotaremos como $\|T\|$:

$$\|T\| = \sup_{\|v\|_1=1} \|Tv\|_2 \tag{1.1}$$

Mas aun, la función $\|\cdot\| : B(V_1, V_2) \rightarrow [0, \infty)$, dada por la expresión anterior, es de hecho una función norma.

Proposición 1.15. *Sean $\langle V_1, \|\cdot\|_1 \rangle$ y $\langle V_2, \|\cdot\|_2 \rangle$, espacios normados. Entonces el conjunto $B(V_1, V_2)$ es un espacio normado, bajo la norma (1.1).*

Demostración

Sin perdida de generalidad podemos suponer que V_1 y V_2 son espacios vectoriales sobre \mathbb{C} . Como es usual en la teoría de funciones, definimos la suma de dos elementos T_1 y T_2 de $B(V_1, V_2)$ como la función que actúa de la forma:

$$(T_1 + T_2)(v) = T_1(v) + T_2(v)$$

Y la multiplicación por escalar como:

$$(\gamma T)(v) = \gamma T(v)$$

$\forall v \in V_1, \forall \gamma \in \mathbb{C}$. Es inmediato ver que la función γT es lineal, ya que:

$$(\gamma T)(\alpha v + \beta w) = \gamma T(\alpha v + \beta w) = \gamma (\alpha T(v) + \beta T(w)) = \alpha (\gamma T)(v) + \beta (\gamma T)(w)$$

La función, $\mathcal{O} : V_1 \rightarrow 0$, en donde 0 es el neutro aditivo del espacio V_2 , esta en $B(V_1, V_2)$ ya que claramente es lineal y acotada, por tanto es un operador lineal. Mas aun, \mathcal{O} es el neutro aditivo del espacio $B(V_1, V_2)$ ($T + \mathcal{O} = T, \forall T \in B(V_1, V_2)$). Al operador \mathcal{O} se le conoce comúnmente como el *operador lineal cero*.

Por la linealidad de T_1 y T_2 , tenemos que:

$$\begin{aligned} (T_1 + T_2)(\alpha v + \beta w) &= T_1(\alpha v + \beta w) + T_2(\alpha v + \beta w) = (\alpha T_1(v) + \beta T_1(w)) + (\alpha T_2(v) + \beta T_2(w)) \\ &= \alpha (T_1 + T_2)(v) + \beta (T_1 + T_2)(w) \end{aligned}$$

$\forall v, w \in V_1, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$. así, la función $T_1 + T_2$ es lineal.

Ahora tomemos $\alpha_0, \beta_0 \in \mathbb{C}$, luego para $T_1, T_2 \in \mathbb{C}$ tenemos que:

$$\begin{aligned} \|(\alpha_0 T_1 + \beta_0 T_2)(v)\|_2 &= \|\alpha_0 T_1(v) + \beta_0 T_2(v)\|_2 \\ &\leq |\alpha_0| \|T_1(v)\|_2 + |\beta_0| \|T_2(v)\|_2 \leq (|\alpha_0| \|T_1\| + |\beta_0| \|T_2\|) \|v\|_1 \end{aligned}$$

Para toda $v \in V_1$.

De esta forma la función $\alpha_0 T_1 + \beta_0 T_2$ es acotada y por tanto $\alpha_0 T_1 + \beta_0 T_2 \in B(V_1, V_2), \forall \alpha_0, \beta_0 \in \mathbb{C}, T_1, T_2 \in B(V_1, V_2)$, lo que hace de $B(V_1, V_2)$ un espacio lineal.

Ahora veamos que efectivamente la función $\|\cdot\| : B(V_1, V_2) \rightarrow [0, \infty)$ es una norma.

Ya que $\langle V_2, \|\cdot\|_2 \rangle$ es un espacio normado, tenemos que para $\hat{v} \in V_1$ con $\|\hat{v}\|_1 = 1$:

$$0 \leq \|T\hat{v}\|_2 \leq \sup_{\|v\|_1=1} \|Tv\|_2 = \|T\|$$

Por tanto $0 \leq \|T\|, \forall T \in B(V_1, V_2)$. Para el operador lineal cero, $\mathcal{O} \in B(V_1, V_2)$, y para toda $v \in V_1$, tenemos que $\|\mathcal{O}(v)\|_2 = 0$, por tanto es claro que:

$$\|\mathcal{O}\| = 0$$

Por otro lado, supongamos que para un operador lineal $T^* \in B(V_1, V_2)$, tenemos que $\|T^*\| = 0$, esto implica que:

$$0 \leq \|T^*v\|_2 \leq \|T^*\| \|v\|_1 = 0$$

así, $\|T^*v\|_2 = 0, \forall v \in V_1$, pero ya que $\|\cdot\|_2$ es una norma, esto sucede, si y solo si, $T^*v = 0$ para toda $v \in V_1$ (en donde este ultimo 0 denota al neutro aditivo de V_2). De esta forma tenemos que $T^* = \mathcal{O}$.

Luego, concluimos que

$$\|T\| = 0 \Leftrightarrow T = \mathcal{O}$$

Ahora tomemos $\alpha \in \mathbb{C}$ y $T \in B(V_1, V_2)$. Luego, ya que $|\alpha| \geq 0$, tenemos que:

$$\|\alpha T\| = \sup_{\|u\|_1=1} \|\alpha Tv\|_2 = \sup_{\|u\|_1=1} |\alpha| \|Tv\|_2 = |\alpha| \sup_{\|u\|_1=1} \|Tv\|_2 = |\alpha| \|T\|$$

Tomemos ahora $T_1, T_2 \in B(V_1, V_2)$, luego ya que $\|\cdot\|_2 \geq 0$:

$$\begin{aligned} \|T_1 + T_2\| &= \sup_{\|u\|_1=1} \|(T_1 + T_2)(u)\|_2 \leq \sup_{\|u\|_1=1} (\|T_1u\|_2 + \|T_2u\|_2) \\ &\leq \sup_{\|u\|_1=1} \|T_1u\|_2 + \sup_{\|u\|_1=1} \|T_2u\|_2 = \|T_1\| + \|T_2\| \end{aligned}$$

Y de esta forma concluimos que $B(V_1, V_2)$ es un espacio normado. \square

Se debe observar que cualquier espacio normado $\langle V, \|\cdot\| \rangle$ es un espacio métrico, definiendo a la función distancia como, $d(v, w) = \|v - w\|$; cuando en un espacio normado la métrica este dada de esta forma la identificaremos como la **métrica inducida**.

Proposición 1.16. *En un espacio normado $\langle X, \|\cdot\| \rangle$ la función definida por, $d(x, y) := \|x - y\|$, es una función distancia.*

Demostración

Ya que $\|\cdot\|$ es una norma, tenemos:

1. $d(x, y) = \|x - y\| \geq 0$.
2. $d(x, y) = \|x - y\| = 0 \Leftrightarrow x - y = 0 \Leftrightarrow x = y$.
3. $d(x, y) = \|x - y\| = |-1| \|y - x\| = \|y - x\| = d(y, x)$.
4. $d(x, y) = \|x - y\| = \|x - z + z - y\| \leq \|x - z\| + \|z - y\| = d(x, z) + d(z, y)$.

\square

Hay entonces una noción de continuidad de funciones en los espacios normados y para las funciones lineales, esta propiedad es capturada precisamente por los operadores lineales acotados.

Teorema 1.17. *Sea T una transformación lineal entre dos espacios normados. Los siguientes enunciados son equivalentes:*

1. T es continua en un punto.
2. T es continua en todo punto.
3. T es acotada.

Demostración

1) \Rightarrow 2) :

Supongamos que T es continua en el punto x_0 del espacio normado $\langle X, \|\cdot\|_1 \rangle$. Sea $\{x_n\} \subset X$ una sucesión tal que, $x_n \rightarrow x_0$, entonces dado $\epsilon > 0$, existe $N \in \mathbb{N}$, tal que si $n \geq N$,

$$\|T(x_n) - T(x_0)\|_2 < \epsilon$$

Sea $\hat{x} \in X$, entonces existe $x^* \in X$, tal que, $\hat{x} = x_0 + x^*$. así tenemos que, $x_n + x^* \rightarrow x_0 + x^* = \hat{x}$. Luego,

$$\|T(x_n + x^*) - T(\hat{x})\|_2 = \|T(x_n) + T(x^*) - T(x^*) - T(x_0)\|_2 = \|T(x_n) - T(x_0)\|_2 < \epsilon$$

para $n \geq N$. Ahora, si $\{y_n\}$ es una sucesión, tal que $y_n \rightarrow \hat{x}$, tenemos que, $y_n - x^* \rightarrow \hat{x} - x^* = x_0$. así, por el argumento anterior, dada $\epsilon > 0$, existe $N \in \mathbb{N}$, tal que,

$$\|T(y_n) - T(\hat{x})\|_2 = \|T((y_n - x_0) + x_0) - T(\hat{x})\|_2 < \epsilon$$

para $n \geq N$. Por tanto, ya que $\hat{x} \in X$ es arbitrario, T es continua en X .
Es evidente que 2) \Rightarrow 1).

2) \Rightarrow 3) :

Supongamos que T no es acotada. Entonces existe una sucesión $\{u_n\} \subset X$, con $\|u_n\|_1 = 1$, tal que, $\|Tu_n\|_2 > n$, $\forall n \in \mathbb{N}$. Luego la sucesión $\{\frac{1}{n}u_n\}$, converge a cero, ya que, $\|\frac{1}{n}u_n\|_1 = \frac{1}{n}$, pero:

$$\left\| T \left(\frac{1}{n} u_n \right) \right\|_2 = \frac{1}{n} \|T(u_n)\|_2 > 1$$

$\forall n \in \mathbb{N}$, lo cual contradice la continuidad de T . Por tanto T es acotada.

3) \Rightarrow 2) :

Supónganos que $x_n \rightarrow x$. así, dado $\epsilon > 0$ existe $n \in \mathbb{N}$, tal que, $\|x_n - x\| < \epsilon/\|T\|$, para $n > N$. Luego ya que T es acotada,

$$\|T(x_n) - T(x)\|_2 = \|T(x_n - x)\|_2 \leq \|T\| \cdot \|x_n - x\|_1 < \epsilon$$

$\forall n > N$. Por tanto, T es continua en X . □

De la desigualdad del triangulo inversa es fácil ver que la norma $\|\cdot\|$, es una función continua en el espacio normado $\langle V, \|\cdot\| \rangle$.

así también, la métrica inducida proporciona la noción de espacio completo en los espacios normados.

Definición 1.18. Decimos que un espacio normado $\langle V, \|\cdot\| \rangle$ es **completo**, si este es completo como espacio métrico bajo la métrica inducida, $d(x, y) = \|x - y\|$.

Un espacio normado completo es conocido como un **espacio de Banach**. En particular, el conjunto de operadores lineales acotados entre los espacios de Banach V_1 y V_2 , $B(V_1, V_2)$ es un espacio de Banach bajo la norma de los operadores definida en (1.1).

Proposición 1.19. Sea $\langle V_1, \|\cdot\|_1 \rangle$ un espacio normado y sea $\langle V_2, \|\cdot\|_2 \rangle$ un espacio de Banach. Entonces el espacio de operadores lineales acotados, $B(V_1, V_2)$ es un espacio de Banach, bajo la norma (1.1).

Demostración

Sea $\{T_n\}_{n=1}^{\infty} \subset B(V_1, V_2)$, una sucesión de Cauchy de operadores lineales acotados. Entonces, para $\epsilon > 0$, existe $N \in \mathbb{N}$, tal que:

$$\|T_m - T_n\| < \epsilon \tag{1.2}$$

$\forall m, n > N$. Luego, para $v \in V_1$ lo anterior implica que:

$$\|T_m v - T_n v\|_2 \leq \|T_m - T_n\| \cdot \|v\|_1 < \epsilon \|v\|_1 \tag{1.3}$$

$\forall m, n > N$. Esto implica que la sucesión $\{T_n v\}_{n=1}^{\infty}$, es de Cauchy en V_2 . Ya que V_2 es de Banach, existe un único elemento en este espacio, al cual la sucesión anterior converge; denotamos a este elemento como Tv . Pero ya que esto sucede para todo $v \in V_1$, definimos a la función $T : V_1 \rightarrow V_2$ como:

$$Tv = \lim_{n \rightarrow \infty} T_n v$$

Por la linealidad del limite, es fácil ver que:

$$\begin{aligned} T(\alpha v + \beta u) &= \lim_{n \rightarrow \infty} T_n(\alpha v + \beta u) = \lim_{n \rightarrow \infty} (\alpha T_n v + \beta T_n u) \\ &= \alpha \lim_{n \rightarrow \infty} T_n v + \beta \lim_{n \rightarrow \infty} T_n u = \alpha Tv + \beta Tu \end{aligned}$$

$\forall u, v \in V_1, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Por tanto T es una función lineal. La expresión (1.3) y la desigualdad del triángulo inversa implican que:

$$\left| \|T_m v\|_2 - \|T_n v\|_2 \right| \leq \epsilon \|v\|_1, \quad \forall n, m > N, \quad \forall v \in V_1$$

tomando el limite cuando $m \rightarrow \infty$ y tomando el hecho de que la norma $\|\cdot\|_2$ es una función continua, tenemos que:

$$0 \leq \left| \|Tv\|_2 - \|T_n v\|_2 \right| \leq \epsilon \|v\|_1, \quad \forall n > N, \quad \forall v \in V_1$$

Luego,

$$0 \leq \|Tv\|_2 \leq \epsilon \|v\|_1 + \|T_n v\|_2 \leq (\epsilon + \|T_n\|) \|v\|_1, \quad \forall n > N, \quad \forall v \in V_1$$

Por tanto $T \in B(V_1, V_2)$. De esta forma, tomando la expresión (1.2), el limite cuando $m \rightarrow \infty$ y el hecho de que la norma $\|\cdot\|$ es una función continua, tenemos que:

$$\|T - T_n\| < \epsilon$$

$\forall n > N$. Por tanto:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} T_n = T$$

en la norma del espacio de operadores. De esta forma $B(V_1, V_2)$ es un espacio de Banach. □

Si $\langle X, \|\cdot\| \rangle$ es un espacio normado, sabemos que X se puede completar como espacio métrico por medio de la métrica inducida. Usando el hecho de que X es denso en \tilde{X} es fácil ver a través del siguiente teorema y su demostración, que este espacio se puede transformar naturalmente y de una sola manera, en un espacio normado.

Teorema 1.20. *Sea T un operador acotado de un espacio normado $\langle V_1, \|\cdot\|_1 \rangle$ a un espacio normado completo (espacio de Banach) $\langle V_2, \|\cdot\|_2 \rangle$. Entonces T puede ser extendido de manera única a un operador acotado (con la misma cota), \tilde{T} , del espacio métrico completo \tilde{V}_1 a $\langle V_2, \|\cdot\|_2 \rangle$.*

Demostración

Sea \tilde{V}_1 el espacio métrico completo que proviene de completar V_1 . Para cada $x \in \tilde{V}_1$ hay una sucesión de elementos $\{x_n\} \subset V_1$ tal que, $x_n \rightarrow x$, cuando $n \rightarrow \infty$. Ya que x_n converge, esta es de Cauchy, entonces, dado $\epsilon > 0$, existe $N \in \mathbb{N}$, tal que si $n, m > N$ implica, $\|x_n - x_m\|_1 < \epsilon/\|T\|$. Luego,

$$\|Tx_n - Tx_m\|_2 = \|T(x_n - x_m)\| \leq \|T\| \cdot \|x_n - x_m\|_1 < \epsilon$$

Esto muestra que $\{Tx_n\}$ es una sucesión de Cauchy en V_2 y ya que este espacio es completo, existe $y \in V_2$, tal que, $Tx_n \rightarrow y$. Definamos $\tilde{T}x = y$. Mostremos que esta definición es independiente de

la sucesión $x_n \rightarrow x$. Si $x_n \rightarrow x$ y $x'_n \rightarrow x$, entonces la sucesión $x_1, x'_1, x_2, x'_2, x_3, x'_3, \dots \rightarrow x$, luego $Tx_1, Tx'_1, Tx_2, Tx'_2, Tx_3, Tx'_3, \dots \rightarrow \hat{y}$, para algún $\hat{y} \in V_2$ por el argumento anterior. Entonces,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} Tx'_n = \hat{y} = \lim_{n \rightarrow \infty} Tx_n = y$$

Mas aun, \tilde{T} es acotada con modulo $\|T\|$, ya que,

$$\|\tilde{T}x\|_2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \|Tx_n\|_2 \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \|T\| \cdot \|x_n\|_1 = \|T\| \cdot \|x\|_1$$

Es claro que de la definición de \tilde{T} ,

$$\tilde{T}(\alpha x) = \lim_{n \rightarrow \infty} T(\alpha x_n) = \alpha \lim_{n \rightarrow \infty} T(x_n) = \alpha \tilde{T}(x)$$

por tanto \tilde{T} es lineal. Mas aun \tilde{T} es única, ya que si, $\hat{T}(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} Tx_n$, en donde $x_n \rightarrow x$, tenemos que,

$$\|\tilde{T}(x) - \hat{T}(x)\| = \|\tilde{T}(x) - T(x_n) + T(x_n) - \hat{T}(x)\| \leq \|\tilde{T}(x) - T(x_n)\| + \|\hat{T}(x) - T(x_n)\| \rightarrow 0$$

cuando $n \rightarrow \infty$. □

Para concluir esta sección y nuestra discusión acerca de los operadores acotados en espacios normados, introduciremos dos diferentes nociones de convergencia de una sucesión de operadores.

Definición 1.21. Sea $\{T_n\}$ una sucesión de operadores acotados entre los espacios de Banach, $\langle V_1, \|\cdot\|_1 \rangle$ y $\langle V_2, \|\cdot\|_2 \rangle$. Diremos que la sucesión $\{T_n\}$ **converge fuertemente** al operador acotado T ($T: V_1 \rightarrow V_2$), si para cada $x \in V_1$ la sucesión de vectores $\{T_n x\}$ converge en V_2 al vector Tx , esto es:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|T_n x - Tx\|_2 = 0, \quad \forall x \in V_1 \quad (1.4)$$

a este tipo de convergencia la denotamos simplemente como, $T_n \rightarrow T$ o de forma mas precisa:

$$T = s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} T_n \quad (1.5)$$

La noción de convergencia fuerte para una sucesión de operadores es bastante general, en particular esta se puede utilizar también en el caso de los operadores no acotados, los cuales no están definidos necesariamente en todo el espacio normado V_1 . En este caso solo hay que considerar a los vectores que estén dentro del dominio de nuestro operador.

Definición 1.22. Sea $\{T_n\}$ una sucesión de operadores acotados entre los espacios de Banach, $\langle V_1, \|\cdot\|_1 \rangle$ y $\langle V_2, \|\cdot\|_2 \rangle$. Diremos que la sucesión $\{T_n\}$ **converge uniformemente** al operador acotado T ($T: V_1 \rightarrow V_2$), si esta converge en la norma $\|\cdot\|$ del espacio de Banach operadores acotados (ec. (1.1)), es esto es:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|T_n - T\| = 0 \quad (1.6)$$

a este tipo de convergencia la denotamos como:

$$T = u\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} T_n \quad (1.7)$$

Es fácil ver que si una sucesión de operadores acotados $\{T_n\}$, ($T_n : V_1 \rightarrow V_2, \forall n$) converge uniformemente a al operador T , entonces esta también converge fuertemente, ya que:

$$\|Tx - T_n x\|_2 \leq \|T - T_n\| \cdot \|x\|_1 \rightarrow 0$$

cuando $n \rightarrow \infty, \forall x \in V_1$.

Capítulo 2

Espacios de Hilbert

En el capítulo anterior hemos dado una generalización de los conceptos de distancia, límite, continuidad y norma para espacios vectoriales, gracias a la introducción de los espacios métricos y los espacios normados. Existen sin embargo, según el álgebra lineal, propiedades lineales, métricas y geométricas de los espacios vectoriales de dimensión finita, cuya generalización a espacios vectoriales de dimensión infinita es vital para dar un fundamento matemático sólido a teorías físicas basadas por completo en espacios de este tipo, tal como sucede con la mecánica cuántica basada en espacios de funciones de cuadrado integrable.

En este capítulo estudiaremos espacios vectoriales con producto interno, una generalización del producto punto usual en espacios vectoriales de dimensión finita. Las propiedades geométricas de estos espacios se siguen de la noción de ángulo, la cual está implícita en la definición del producto interno.

Definición 2.1. *Un espacio vectorial V sobre \mathbb{C} es llamado un **espacio con producto interno** si existe una función compleja (\cdot, \cdot) en $V \times V$ que satisfaga las siguientes cuatro condiciones para todo $x, y, z \in V$ y $\alpha \in \mathbb{C}$.*

1. $(x, x) \geq 0$ y $(x, x) = 0$, si y solo si, $x = 0$ (positiva definida).
2. $(x, y + z) = (x, y) + (x, z)$.
3. $(x, \alpha y) = \alpha (x, y)$.
4. $(x, y) = \overline{(y, x)}$ (anti linealidad).

La función (\cdot, \cdot) es llamada un **producto interno**.

Se debe notar que las condiciones 2), 3), y 4) de la definición anterior, implican que,

$$(x, \alpha y + \beta z) = \alpha (x, y) + \beta (x, z)$$

y que,

$$(\alpha x, y) = \bar{\alpha} (x, y)$$

De la linealidad de las entradas del producto interno, es fácil ver que:

$$(x, 0) = (0, x) = 0 \quad \forall x \in V$$

en donde 0, dentro del producto interno se refiere a la neutro aditivo de V y 0 en el lado derecho de la igualdad, es el 0 de \mathbb{C} . No importando en que campo estemos trabajando, al neutro aditivo de este siempre lo podemos denotar como 0 sin ambigüedad.

En la siguiente definición se establece la primera noción geométrica de los espacios vectoriales con producto interno.

Definición 2.2. Se dice que dos vectores x , y de un espacio con producto interno V , son **ortogonales** si $(x, y) = 0$. Una colección de vectores $\{x_i\}$ de V es llamada un **conjunto ortonormal** si $(x_i, x_i) = 1$ para toda i , $(x_i, x_j) = 0$ si $i \neq j$.

Por el momento denotaremos por $\|x\| := \sqrt{(x, x)}$ y mas adelante mostraremos que en efecto, $\|\cdot\|$ es una norma.

Teorema 2.3. (Teorema de Pitágoras) Sea $\{x_n\}_{n=1}^N$ un conjunto ortonormal en un espacio con producto interno V . Entonces para toda $x \in V$,

$$\|x\|^2 = \sum_{n=1}^N |(x, x_n)|^2 + \left\| x - \sum_{n=1}^N (x_n, x) x_n \right\|^2$$

Demostración

Escribimos a x como,

$$x = \sum_{n=1}^N |(x, x_n)|^2 x_n + \left(x - \sum_{n=1}^N |(x, x_n)|^2 x_n \right)$$

Luego, tenemos que

$$\begin{aligned} \left(\sum_{n=1}^N (x_n, x) x_n, x - \sum_{n=1}^N (x_n, x) x_n \right) &= \left(\sum_{n=1}^N (x_n, x) x_n, x \right) - \left(\sum_{n=1}^N (x_n, x) x_n, \sum_{n=1}^N (x_n, x) x_n \right) \\ &= \sum_{n=1}^N \overline{(x_n, x)} (x_n, x) - \sum_{n=1}^N \overline{(x_n, x)} (x_n, x) = 0 \end{aligned}$$

por tanto, $\sum_{n=1}^N (x_n, x) x_n$ y $x - \sum_{n=1}^N |(x, x_n)|^2 x_n$, son ortogonales.

Entonces,

$$\begin{aligned} \|x\|^2 = (x, x) &= \left\| \sum_{n=1}^N |(x, x_n)|^2 x_n \right\|^2 + \left\| x - \sum_{n=1}^N |(x, x_n)|^2 x_n \right\|^2 \\ &= \sum_{n=1}^N |(x_n, x)|^2 + \left\| x - \sum_{n=1}^N |(x, x_n)|^2 x_n \right\|^2 \end{aligned}$$

□

Ya que la norma de un vector es siempre un número positivo es fácil ver el siguiente resultado.

Corolario 2.4. (Desigualdad de Bessel) Sea $\{x_n\}_{n=1}^N$ un conjunto ortonormal de un espacio con producto interno V . Entonces para toda $x \in V$,

$$\|x\|^2 \geq \sum_{n=1}^N |(x_n, x)|^2$$

Corolario 2.5. (Desigualdad de Schwarz) Sea V un espacio con producto interno y sean $x, y \in V$. Entonces,

$$|(x, y)| \leq \|x\| \|y\|$$

Demostración

El caso $y = 0$ es inmediato, entonces supongamos que $y \neq 0$. El vector $\frac{y}{\|y\|}$ forma un conjunto ortonormal por si mismo, entonces aplicando la desigualdad de Bessel a cualquier $x \in V$ obtenemos,

$$\|x\|^2 \geq \left| \left(x, \frac{y}{\|y\|} \right) \right|^2 = \frac{|(x, y)|^2}{\|y\|^2}$$

de donde obtenemos, $|(x, y)| \leq \|x\| \|y\|$. □

Es interesante ver cuando la desigualdad de Schwarz se hace una igualdad.

Proposición 2.6. *Sea V un espacio con producto interno y sean $x, y \in V$. Entonces,*

$$|(x, y)| = \|x\| \|y\|$$

si y solo si, $y = \alpha x$, con $\alpha \in \mathbb{C}$.

Demostración

Los casos, $x = 0$ y/o $y = 0$, son inmediatos. Supongamos entonces $x \neq 0$, $y \neq 0$.

⇐] Si $\alpha \in \mathbb{C}$, es claro que por la propiedades del producto escalar,

$$|(x, y)| = |(x, \alpha x)| = |\alpha| \cdot \|x\| \cdot \|x\| = \|x\| \cdot \|\alpha x\| = \|x\| \cdot \|y\|$$

⇒] Supongamos que $|(x, y)| = \|x\| \|y\|$. Definimos a los vectores,

$$y_{\parallel} := \left(\frac{x}{\|x\|}, y \right) \frac{x}{\|x\|} \tag{2.1}$$

$$y_{\perp} := y - \left(\frac{x}{\|x\|}, y \right) \frac{x}{\|x\|} \tag{2.2}$$

es claro que, $y = y_{\parallel} + y_{\perp}$ y que, $(y_{\parallel}, y_{\perp}) = 0$. Entonces por el teorema de Pitágoras,

$$\|y\|^2 = \|y_{\parallel}\|^2 + \|y_{\perp}\|^2 = \left| \left(\frac{x}{\|x\|}, y \right) \right|^2 + \left\| y - \left(\frac{x}{\|x\|}, y \right) \frac{x}{\|x\|} \right\|^2$$

Luego, ya que por hipótesis tenemos $\|x\|^2 \|y\|^2 = |(x, y)|^2$,

$$\|x\|^2 \|y\|^2 = |(x, y)|^2 + \|x\|^2 \left\| y - \left(\frac{x}{\|x\|}, y \right) \frac{x}{\|x\|} \right\|^2 = |(x, y)|^2$$

esto implica que,

$$\left\| y - \left(\frac{x}{\|x\|}, y \right) \frac{x}{\|x\|} \right\| = 0$$

pero esto sucede si y solo si,

$$y = \left(\frac{x}{\|x\|}, y \right) \frac{x}{\|x\|} = \left(\frac{x}{\|x\|}, \frac{y}{\|x\|} \right) x$$

□

Otra identidad geométrica muy útil es la **ley del paralelogramo**, cuya demostración surge inmediatamente de la definición de $\| \cdot \|$:

$$\|x + y\|^2 + \|x - y\|^2 = 2 \|x\|^2 + 2 \|y\|^2 \tag{2.3}$$

En el capítulo anterior observamos que todo espacio normado es un espacio métrico. El siguiente teorema muestra que todo espacio con producto interior es un espacio normado.

Teorema 2.7. *Todo espacio con producto interior V es un espacio normado, con la norma $\|x\| = (x, x)^{1/2}$.*

Demostración

Ya que V es un espacio vectorial, solo necesitamos verificar que la función $\|\cdot\|$ tiene todas las propiedades de una norma. Todas estas propiedades se siguen inmediatamente de las propiedades 1) a 4) del producto interno, con excepción de la desigualdad del triángulo. Sean $x, y \in V$, entonces por la desigualdad de Schwarz,

$$\begin{aligned} \|x + y\|^2 &= (x + y, x + y) = (x, x) + (x, y) + (y, x) + (y, y) \\ &= (x, x) + 2 \operatorname{Re}(x, y) + (y, y) \\ &\leq (x, x) + 2 |(x, y)| + (y, y) \\ &\leq (x, x) + 2 (x, x)^{1/2} (y, y)^{1/2} + (y, y) \end{aligned}$$

Luego,

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$$

Es interesante ver cuando la desigualdad del triángulo es una igualdad. Para esto supongamos que $\|x + y\| = \|x\| + \|y\|$. Luego desarrollando el cuadrado de esta igualdad, tenemos que:

$$\begin{aligned} \|x + y\|^2 &= (x + y, x + y) = \|x\|^2 + 2 \operatorname{Re}(x, y) + \|y\|^2 \\ (\|x\| + \|y\|)^2 &= \|x\|^2 + 2 \|x\| \cdot \|y\| + \|y\|^2 \end{aligned}$$

esto implica que:

$$\|x\| \cdot \|y\| = \operatorname{Re}(x, y)$$

mas aun, por la desigualdad de Schwarz:

$$0 \leq |\operatorname{Re}(x, y)| \leq |(x, y)| \leq \|x\| \cdot \|y\| = \operatorname{Re}(x, y)$$

tomando el hecho de que $\operatorname{Re}(x, y) \leq |(x, y)|$, tenemos que:

$$0 \leq |(x, y)| = \|x\| \cdot \|y\| = \operatorname{Re}(x, y)$$

esto implica que $(x, y) \in \mathbb{R}$. Luego tenemos que:

$$0 \leq (x, y) = \|x\| \cdot \|y\|$$

Pero por la proposición 2.6 tenemos que esto sucede, si y solo si, $y = \alpha x$, en este caso con α un real positivo ya que de lo contrario lo anterior no se cumpliría. El recíproco de esta proposición es inmediato. Por tanto la desigualdad del triángulo es una igualdad, si y solo si, $y = \alpha x$ con $0 \leq \alpha$. \square

El teorema anterior muestra que los espacios con producto interior poseen una métrica natural,

$$d(x, y) = \sqrt{(x - y, x - y)}$$

entonces, tenemos las nociones de convergencia, completitud y densidad definidas para espacios métricos. Mas aun, con la función distancia anterior y la desigualdad de Schwarz podemos mostrar que la función (\cdot, \cdot) es continua en V .

Proposición 2.8. Para todo $x \in V$ el producto escalar es una función continua de su primera entrada (\cdot, x) , de su segunda entrada (x, \cdot) y de ambas (\cdot, \cdot) .

Demostración

El caso en el que $x = 0$ es inmediato. Sea $x \in V$ tal que, $x \neq 0$ y sea $\{y_n\} \subset V$, tal que, $y_n \rightarrow y \in V$ cuando $n \rightarrow \infty$. Luego por la desigualdad de Schwarz tenemos que,

$$|(y_n, x) - (y, x)| = |(y_n - y, x)| \leq \|y_n - y\| \cdot \|x\| \rightarrow 0 \quad (2.4)$$

$$|(x, y_n) - (x, y)| = |(x, y_n - y)| \leq \|x\| \cdot \|y_n - y\| \rightarrow 0 \quad (2.5)$$

cuando $n \rightarrow \infty$. Por tanto, el producto escalar es una función continua de su primera entrada y su segunda entrada.

Sea $\{x_n\} \subset V$, tal que, $x_n \rightarrow x \in V$ cuando $n \rightarrow \infty$. De la desigualdad del triangulo tenemos que,

$$\left| \|x_n\| - \|x\| \right| \leq \|x_n - x\|$$

de donde es fácil ver que entonces existe un real $C \geq 0$, tal que, $C = \sup_n \{\|x_n\|\}$. Luego por la desigualdad de Schwarz tenemos que,

$$\begin{aligned} |(x_n, y_n) - (x, y)| &= |(x_n, y_n) - (x_n, y) + (x_n, y) - (x, y)| = |(x_n, y_n - y) + (x_n - x, y)| \\ &\leq |(x_n, y_n - y)| + |(x_n - x, y)| \leq \|x_n\| \cdot \|y_n - y\| + \|x_n - x\| \cdot \|y\| \\ &\leq C \cdot \|y_n - y\| + \|x_n - x\| \cdot \|y\| \rightarrow 0 \end{aligned}$$

cuando $n \rightarrow \infty$. Por tanto, el producto escalar es una función continua de ambas de sus entradas. \square

Otra propiedad importante de la norma generada por un producto interno, es la identidad de polarización, la cual nos permite recuperar al producto interno directamente de la norma:

$$(x, y) = \frac{1}{4} [(\|x + y\|^2 - \|x - y\|^2) - i(\|x + iy\|^2 - \|x - iy\|^2)] \quad (2.6)$$

En particular, siempre podemos completar a V en un espacio normado \tilde{V} en el que V es isométrico a un subconjunto denso de este. De hecho \tilde{V} es también un espacio con producto interior ya que el producto interno de V puede ser extendido a \tilde{V} por continuidad.

Proposición 2.9. Sea V un espacio con producto interno y sea \tilde{V} el espacio que resulta de completar a V como espacio métrico, entonces \tilde{V} es un espacio con producto interno.

Demostración

Sean $x, y \in \tilde{V}$ entonces, ya que V es isométricamente denso en \tilde{V} existen dos sucesiones de elementos de V , $\{x_n\}$ y $\{y_n\}$ convergentes (y por tanto de Cauchy) en \tilde{V} , tales que $x_n \rightarrow x$, $y_n \rightarrow y$, cuando $n \rightarrow \infty$. La desigualdad del triangulo implica,

$$\left| \|x_n\| - \|x_m\| \right| \leq \|x_n - x_m\|$$

$$\left| \|y_n\| - \|y_m\| \right| \leq \|y_n - y_m\|$$

Por tanto las sucesiones de números reales $\{\|x_n\|\}$, $\{\|y_n\|\}$ son de Cauchy y acotadas, es decir existen reales positivos C_x y C_y tales que, $C_x = \sup_n \{\|x_n\|\}$ y $C_y = \sup_n \{\|y_n\|\}$. Luego por la desigualdad de Schwarz tenemos que,

$$|(x_n, y_n) - (x_m, y_m)| = |(x_n, y_n) - (x_m, y_n) + (x_m, y_n) - (x_m, y_m)|$$

$$\begin{aligned} &\leq \|x_n - x_m\| \cdot \|y_n\| + \|x_m\| \cdot \|y_n - y_m\| \\ &\leq C_y \cdot \|x_n - x_m\| + C_x \cdot \|y_n - y_m\| \end{aligned}$$

así, la sucesión de números complejos (x_n, y_n) es de Cauchy y por tanto convergente. De esta forma definimos, para $x, y \in \tilde{V}$:

$$(x, y) = \lim_{n \rightarrow \infty} (x_n, y_n)$$

Mas aun, el valor de (x, y) es independiente de la sucesión. Para ver esto supongamos que existen dos sucesiones de elementos de V , $\{\hat{x}_n\}$ y $\{\hat{y}_n\}$ convergentes (y por tanto de Cauchy) en \tilde{V} , tales que $\hat{x}_n \rightarrow x$, $\hat{y}_n \rightarrow y$, cuando $n \rightarrow \infty$. Luego por la desigualdad de Schwarz y la desigualdad del triángulo:

$$\begin{aligned} |(x_n, y_n) - (\hat{x}_n, \hat{y}_n)| &= |(x_n, y_n) - (x_n, \hat{y}_n) + (x_n, \hat{y}_n) - (\hat{x}_n, \hat{y}_n)| \\ &\leq \|x_n\| \cdot \|y_n - \hat{y}_n\| + \|y_n\| \cdot \|x_n - \hat{x}_n\| \leq C_x \cdot \|y_n - \hat{y}_n\| + C_y \cdot \|x_n - \hat{x}_n\| \\ &\leq C_x(\|y_n - y\| + \|\hat{y}_n - y\|) + C_y(\|x_n - x\| + \|\hat{x}_n - x\|) \rightarrow 0 \end{aligned}$$

cuando $n \rightarrow \infty$.

Ahora verifiquemos que (\cdot, \cdot) cumple con las cuatro propiedades del producto interno en \tilde{V} .

1) Ya que para $x \in \tilde{V}$ el valor de (x, x) no depende de la sucesión de elementos $\{x_n\} \subset V$, podemos hacer $(x, x) = \lim_{n \rightarrow \infty} (x_n, x_n)$ y ya que $(x_n, x_n) \geq 0$, $\forall x_n \in V$, tenemos que:

$$0 \leq \lim_{n \rightarrow \infty} (x_n, x_n) = (x, x)$$

por tanto $0 \leq (x, x)$, $\forall x \in \tilde{V}$.

Sea $z \in \tilde{V}$, tal que, $z \neq 0$. Entonces, ya que los espacios métricos son espacios Hausdorff, existe una bola de radio $r > 0$ con centro en z , para la cual $0 \notin \overline{B_r(z)}$, esto implica que para algún $\epsilon > 0$ existe una bola alrededor de cero tal que, $B_{\sqrt{\epsilon}}(0) \cap B_r(z) = \emptyset$. Sea $\{z_n\} \subset V$ una sucesión tal que, $z_n \rightarrow z$, cuando $n \rightarrow \infty$; sin perdida de generalidad podemos suponer que $z_n \in B_r(z) \forall n$. así, tenemos que, $(z_n, z_n) = \|z_n\|^2 = \|z_n - 0\|^2 = d^2(0, z_n) > \epsilon > 0$. Luego,

$$0 < \epsilon < \lim_{n \rightarrow \infty} (z_n, z_n) = (z, z)$$

por tanto $(z, z) > 0$, para $z \in \tilde{V}$ tal que, $z \neq 0$. Ya que V es un espacio vectorial isométricamente denso en \tilde{V} , V es isométrico a un sub espacio vectorial de \tilde{V} y por tanto para $0 \in \tilde{V}$, tenemos $(0, 0) = 0$.

Verificar las propiedades 2), 3) y 4) es inmediato de la definición del producto interno y las propiedades elementales de limites de números complejos. □

Definición 2.10. *Un espacio con producto interno y completo es llamado un espacio de Hilbert. Los espacios con producto interno son llamados algunas veces espacios pre-Hilbert.*

De la definición anterior se debe de notar que todo espacio de Hilbert es un espacio de Banach. Sin embargo el teorema de Jordan - von Newman muestra que lo contrario no es siempre cierto (*ref-telsch*).

Definición 2.11. Decimos que dos espacios de Hilbert \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 son **isomorfos** si existe un operador lineal biyectivo U de \mathcal{H}_1 a \mathcal{H}_2 , tal que, $(Ux, Uy)_{\mathcal{H}_2} = (x, y)_{\mathcal{H}_1}$, para todo $x, y \in \mathcal{H}_1$. Tal operador es conocido como un **operador unitario**.

El ejemplo mas sencillo de un espacio de Hilbert es, de nueva cuenta, \mathbb{R}^n así como \mathbb{C}^n , ambos de dimensión finita, a saber n . Un ejemplo mas interesante es el espacio vectorial de las funciones de cuadrado integrable en el sentido de Lesbegue en \mathbb{R}^n , denotado por $L^2(\mathbb{R}^n)$, el cual es de dimensión infinita. Mas adelante mostraremos que este espacio es en efecto un espacio de Hilbert, además de discutir el papel crucial que este juega en la mecánica cuántica.

2.1. El lema de Riesz

Consideremos a un sub espacio cerrado \mathcal{M} , de un espacio de Hilbert \mathcal{H} . Es fácil ver que \mathcal{M} es un espacio de Hilbert por si mismo, bajo el producto interno que hereda de forma natural de \mathcal{H} . Denotamos por \mathcal{M}^\perp al conjunto de vectores en \mathcal{H} que son ortogonales a todos los vectores de \mathcal{M} ; \mathcal{M}^\perp es llamado el **complemento ortogonal** de \mathcal{M} .

Proposición 2.12. \mathcal{M}^\perp es un espacio de Hilbert.

Demostración

Sean $x, y \in \mathcal{M}^\perp$, $z \in \mathcal{M}$ y sean $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Entonces por la linealidad del producto interno, tenemos que,

$$(z, \alpha x + \beta y) = (z, \alpha x) + (z, \beta y) = \alpha(z, x) + \beta(z, y) = 0$$

y ya que $(\alpha x + \beta y, z) = \overline{(z, \alpha x + \beta y)} = 0$, tenemos que $\alpha x + \beta y \in \mathcal{M}^\perp$. Ya que $(0, z) = 0, \forall z \in \mathcal{M}$, concluimos que $0 \in \mathcal{M}^\perp$. Por tanto \mathcal{M}^\perp es un sub espacio vectorial de \mathcal{H} .

Sea $x^* \in \mathcal{H}$ un punto limite de \mathcal{M}^\perp . Entonces existe una sucesión $\{x_n\} \subset \mathcal{M}^\perp$, tal que, $x_n \rightarrow x^*$, cuando $n \rightarrow \infty$. Luego, por la continuidad en las entradas del producto escalar, tenemos que:

$$(x^*, z) = \left(\lim_{n \rightarrow \infty} x_n, z \right) = \lim_{n \rightarrow \infty} (x_n, z) = 0$$

así, $x^* \in \mathcal{M}^\perp$. Por tanto \mathcal{M}^\perp contiene a todos sus puntos limite y ya que \mathcal{H} es completo, toda sucesión de Cauchy de elementos de \mathcal{M}^\perp tiene limite en \mathcal{H} , a saber, en un punto limite de \mathcal{M}^\perp .

Por tanto \mathcal{M}^\perp es completo. □

Hay que notar que el único elemento que \mathcal{M} y \mathcal{M}^\perp tienen en común es $0 \in \mathcal{H}$. Para ver esto, sea $x \in \mathcal{M} \cap \mathcal{M}^\perp$, entonces $(x, z) = 0, \forall z \in \mathcal{M}$, en particular para $z = x$, luego $(x, x) = \|x\|^2 = 0$, pero esto sucede si y solo si, $x = 0$.

El siguiente teorema muestra que para cualquier sub espacio propio cerrado de \mathcal{H} , siempre hay vectores perpendiculares a este, de hecho muestra que hay tantos que podemos representar a \mathcal{H} como:

$$\mathcal{H} = \mathcal{M} + \mathcal{M}^\perp := \{x + y \mid x \in \mathcal{M}, y \in \mathcal{M}^\perp\}$$

Para hacer esto, establecemos primero el siguiente lema.

Lema 2.13. Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert, sea \mathcal{M} un sub espacio cerrado de \mathcal{H} y supongamos que $x \in \mathcal{H}$. Entonces existe en \mathcal{M} un único elemento z , el cual es el mas cercano a x .

Demostración

El caso en el que $x \in \mathcal{M}$ es inmediato haciendo $z = x$. Supongamos que $x \notin \mathcal{M}$. Sea $d = \inf_{y \in \mathcal{M}} \|x - y\|$. Tomemos una sucesión $\{y_n\} \subset \mathcal{M}$, tal que,

$$\|x - y_n\| \rightarrow d$$

Entonces,

$$\begin{aligned} \|y_n - y_m\|^2 &= \|(y_n - x) - (y_m - x)\|^2 \\ &= 2\|y_n - x\|^2 + 2\|y_m - x\|^2 - \| -2x + y_n + y_m \|^2 \\ &= 2\|y_n - x\|^2 + 2\|y_m - x\|^2 - 4\|x - (1/2)(y_n + y_m)\|^2 \\ &\leq 2\|y_n - x\|^2 + 2\|y_m - x\|^2 - 4d^2 \\ &\rightarrow 2d^2 + 2d^2 - 4d^2 = 0 \end{aligned}$$

cuando $n \rightarrow \infty$ y $m \rightarrow \infty$. La segunda igualdad se sigue de la ley del paralelogramo y la desigualdad del hecho que $(1/2)(y_n + y_m) \in \mathcal{M}$. Entonces $\{y_n\}$ es de Cauchy y ya que \mathcal{M} es cerrado, $\{y_n\}$ converge a un elemento z de \mathcal{M} . Por la continuidad de la norma,

$$\|x - z\| = \|x - \lim_{n \rightarrow \infty} y_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|x - y_n\| = d$$

Mas aun, z es único. Supongamos que existe otro $z^* \in \mathcal{M}$ tal que, $\|x - z^*\| = d$, luego $\frac{z+z^*}{2} \in \mathcal{M}$. Supongamos que existe $\alpha \geq 0$ tal que, $x - z = \alpha(x - z^*)$. Esto implica que $x = \frac{z - \alpha z^*}{1 - \alpha} \in \mathcal{M}$, lo cual es una contradicción ya que \mathcal{M} es un espacio vectorial y $x \notin \mathcal{M}$, por tanto no existe tal $\alpha \geq 0$. Luego, tenemos una desigualdad estricta en la siguiente aplicación de la desigualdad del triángulo:

$$\left\| x - \frac{z + z^*}{2} \right\| = \frac{1}{2} \|2x - z - z^*\| < \frac{1}{2} (\|x - z\| + \|x - z^*\|) = d$$

así, $\|x - \frac{z+z^*}{2}\| < d$, para $\frac{z+z^*}{2} \in \mathcal{M}$, lo cual es claramente una contradicción. Por tanto z es único. \square

Teorema 2.14. (Teorema de proyección) *Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert y \mathcal{M} un sub espacio cerrado. Entonces todo $x \in \mathcal{H}$ puede ser escrito de forma única como $x = z + w$, en donde $z \in \mathcal{M}$ y $w \in \mathcal{M}^\perp$.*

Demostración

Sea $x \in \mathcal{H}$. Entonces por el lema anterior hay un único elemento $z \in \mathcal{M}$ el cual es el mas cercano a x . Definimos $w = x - z$, entonces $x = z + w$. Sea $y \in \mathcal{M}$ y $t \in \mathbb{R}$. Si $d = \|x - z\|$, entonces:

$$d^2 \leq \|x - (z + ty)\|^2 = \|w - ty\|^2 = d^2 - 2t\operatorname{Re}(w, y) + t^2\|y\|^2$$

Entonces, $-2t\operatorname{Re}(w, y) + t^2\|y\|^2$ para toda t , esto implica que $\operatorname{Re}(w, y) = 0$. De forma similar usando it en lugar de t mostramos que $\operatorname{Im}(w, y) = 0$. Por tanto, $w \in \mathcal{M}^\perp$.

Sean $z_2 \in \mathcal{M}$ y $w_2 \in \mathcal{M}^\perp$. Supongamos que $x = z + w = z_2 + w_2$, luego:

$$z - z_2 = w_2 - w \in \mathcal{M} \cap \mathcal{M}^\perp$$

implicando que $z - z_2 = w_2 - w = 0$. Por tanto la representación de $x = z + w$ es única. \square

En el capitulo anterior ya hemos estudiado a los operadores lineales acotados entre espacios normados. Denotaremos por $\mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ al conjunto de operadores lineales acotados entre los espacios de Hilbert \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 . Un caso particular de este conjunto es cuando $\mathcal{H}_2 = \mathbb{C}$:

Definición 2.15. El espacio $\mathcal{L}(\mathcal{H}, \mathbb{C})$ es llamado el **espacio dual** de \mathcal{H} y es denotado por \mathcal{H}^* . Los elementos de \mathcal{H}^* son llamados **funcionales lineales continuos**.

El siguiente teorema da una caracterización de \mathcal{H}^* .

Teorema 2.16. (Lema de Riesz) Para cada $T \in \mathcal{H}^*$ existe un único $y_T \in \mathcal{H}$, tal que, $T(x) = (y_T, x)$ para todo $x \in \mathcal{H}$. Además $\|y_T\|_{\mathcal{H}} = \|T\|_{\mathcal{H}^*}$.

Demostración

Sea \mathcal{N} el conjunto de $x \in \mathcal{H}$ tales que, $T(x) = 0$. Por la continuidad de T , \mathcal{N} es un sub espacio cerrado. Si $\mathcal{N} = \mathcal{H}$, entonces $T(x) = 0 = (0, x)$ para todo x y así T es el operador constante cero.

Supongamos ahora que \mathcal{N} es un sub espacio propio de \mathcal{H} . Entonces por el teorema de proyección hay un vector x_0 diferente de cero en \mathcal{N}^\perp . Definamos $y_T = \overline{T(x_0)} \|x_0\|^{-2} x_0$. Verifiquemos que el vector y_T tiene propiedades correctas. Primero, si $x \in \mathcal{N}$, entonces:

$$T(x) = 0 = (y_T, x)$$

Mas aun, si $x = \alpha x_0$, entonces:

$$T(x) = T(\alpha x_0) = \alpha T(x_0) = \left(\overline{T(x_0)} \|x_0\|^{-2} x_0, \alpha x_0 \right) = (y_T, \alpha x_0)$$

Ya que las funciones $T(\cdot)$ y (y_T, \cdot) son lineales y concuerdan en \mathcal{N} y x_0 , estas deben de concordar también en el espacio generado por \mathcal{N} y x_0 . Pero \mathcal{N} y x_0 generan a todo \mathcal{H} ya que todo elemento $y \in \mathcal{H}$ puede ser escrito como:

$$y = \left(y - \frac{T(y)}{T(x_0)} x_0 \right) + \frac{T(y)}{T(x_0)} x_0$$

Entonces, $T(x) = (y_T, x)$ para todo $x \in \mathcal{H}$. Si también $T(x) = (y', x)$ entonces:

$$\|y' - y_T\|^2 = T(y' - y_T) - T(y' - y_T) = 0$$

así, $y' = y_T$.

Luego, observamos que:

$$\|T\| = \sup_{\|x\|=1} |T(x)| = \sup_{\|x\|=1} |(y_T, x)| \leq \sup_{\|x\|=1} \|y_T\| \cdot \|x\| = \|y_T\|$$

$$\|T\| = \sup_{\|x\|=1} |T(x)| \geq \left| T \left(\frac{y_T}{\|y_T\|} \right) \right| = \left(y_T, \frac{y_T}{\|y_T\|} \right) = \|y_T\|$$

por tanto $\|T\| = \|y_T\|$.

□

Debe observarse que la desigualdad de Schwarz provee el regreso del teorema de Riesz, es decir, cada $y \in \mathcal{H}$ define un funcional lineal continuo T_y en \mathcal{H} mediante $T_y(x) = (y, x)$.

2.2. Bases ortonormales

Ya hemos definido lo que es un conjunto de vectores ortonormales en un espacio de Hilbert. En esta sección desarrollaremos esta idea mas allá; en particular queremos extender la idea de "base" de los espacios vectoriales de dimensión finita, a los espacios normados completos con producto interno. Si \mathcal{S} es un conjunto ortonormal en un espacio de Hilbert \mathcal{H} y no existe otro conjunto ortonormal que contenga a \mathcal{S} como subconjunto propio, entonces \mathcal{S} es conocido como una **base ortonormal** (o **sistema ortonormal completo**) para \mathcal{H} . Para desarrollar estas ideas de forma clara, primero estableceremos algunas definiciones y teoremas sobre teoría de conjuntos que necesitaremos mas adelante.

Definición 2.17. *Sea X un conjunto. Una relación R en X es llamada una **relación de equivalencia** si satisface:*

1. *Para todo $x \in X$, xRx (propiedad reflexiva).*
2. *Para todo $x, y \in X$, xRy implica yRx (propiedad simétrica).*
3. *Para todo $x, y, z \in X$, xRy y yRz implican xRz (propiedad transitiva).*

*Al conjunto de elementos de X que están relacionados a un $x \in X$, se le conoce como la **clase de equivalencia** de x .*

Por medio de las tres propiedades anteriores la demostración del siguiente teorema es inmediata.

Teorema 2.18. *Sea R una relación de equivalencia en un conjunto X . Entonces cada $x \in X$ pertenece a una única clase de equivalencia.*

Definición 2.19. *Una relación en un conjunto X , que sea reflexiva, transitiva y anti simétrica (esto es xRy y yRx , implican $x = y$) es llamada un **orden parcial**. Si R es un orden parcial escribiremos $x < y$ en lugar de xRy .*

Un ejemplo de un orden parcial es el siguiente. Sea X la colección de todos los subconjuntos de un conjunto Y . Definamos $A < B$ si $A \subset B$. Entonces $<$ es un orden parcial. †

En la definición anterior usamos el termino *parcial*, por que dos elementos arbitrarios de X no necesariamente deben de cumplir $x < y$ ó $y < x$. Sin embargo, si para toda pareja $x, y \in X$ se satisface $x < y$ o $y < x$, se dice que X esta **linealmente ordenado**. Por ejemplo \mathbb{R} con el orden usual " \leq " esta linealmente ordenado.

Supongamos que X esta parcialmente ordenado por " $<$ " y que $Y \subset X$. Un elemento $p \in X$ es llamado una **cota superior** para Y , si $y < p$, para toda $y \in Y$. Si $m \in X$ y $m < x$ implica $x = m$, decimos que m es un **elemento maximal** de X .

Establecemos el siguiente teorema sin demostración ya que esta requiere de una teoría de conjuntos mas elaborada. Solo hemos de mencionar que el siguiente resultado es equivalente al axioma de elección.

Teorema 2.20. Lema de Zorn *Sea X un conjunto no vacío parcialmente ordenado, con la propiedad que cada subconjunto linealmente ordenado tiene una cota superior en X . Entonces cada conjunto linealmente ordenado tiene una cota superior que es también un elemento maximal de X .*

Con lo anterior establecido, estamos listos para el primer teorema acerca de bases en espacios de Hilbert.

Teorema 2.21. *Todo espacio de Hilbert \mathcal{H} tiene una base ortonormal.*

Demostración

Consideremos la colección \mathcal{C} de conjuntos ortonormales en \mathcal{H} . Ordenamos a \mathcal{C} por inclusión, es decir, decimos que $S_1 < S_2$ si, $S_1 \subset S_2$. Con esta definición de " $<$ ", \mathcal{C} esta parcialmente ordenado; también es no vacío ya que si v es un elemento de \mathcal{H} , el conjunto que consiste solo de $v/\|v\|$ es un conjunto ortonormal. Sea $\{S_\alpha\}_{\alpha \in A}$ un subconjunto linealmente ordenado de \mathcal{C} . Luego, $\bigcup_{\alpha \in A} S_\alpha$ es un conjunto ortonormal que contiene a cada S_α y es entonces una cota superior para $\{S_\alpha\}_{\alpha \in A}$. Ya que todo subconjunto linealmente ordenado de \mathcal{C} tiene una cota superior, podemos aplicar el lema de Zorn y concluir que \mathcal{C} tiene un elemento maximal; esto es, un sistema ortonormal que no esta contenido propiamente en otro sistema ortonormal. \square

Es en este punto en el que debemos hacer la observación de que los sistemas ortonormales no tienen que ser necesariamente conjunto finitos, ya que podemos tener el caso en el que estos son de cardinalidad infinita, incluso no numerable. El siguiente teorema muestra que todo elemento de un espacio de Hilbert puede ser expresado como una combinación lineal (posiblemente infinita) de elementos de la base, tal como sucede en los espacios vectoriales de dimensión finita.

Teorema 2.22. *Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert y $S = \{x_\alpha\}_{\alpha \in A}$ una base ortonormal. Entonces para cada $y \in \mathcal{H}$,*

$$y = \sum_{\alpha \in A} (x_\alpha, y) x_\alpha$$

y

$$\|y\|^2 = \sum_{\alpha \in A} |(x_\alpha, y)|^2$$

La primera igualdad significa que la suma del lado derecho converge (independientemente del orden) a $y \in \mathcal{H}$. así también, si $\sum_{\alpha \in A} |c_\alpha|^2 < \infty$, $c_\alpha \in \mathbb{C}$, entonces $\sum_{\alpha \in A} c_\alpha x_\alpha$ converge a un elemento de \mathcal{H} .

Demostración

La desigualdad de Bessel establece que para todo conjunto finito $A' \subset A$ tenemos que, $\sum_{\alpha \in A'} |(x_\alpha, y)|^2 \leq \|y\|^2$. Entonces $(x_\alpha, y) \neq 0$, a lo mas para una cantidad numerable de $\alpha \in A$ las cuales ordenamos de alguna manera $\alpha_1, \alpha_2, \dots$, mas aun, ya que $\sum_{j=1}^N |(x_{\alpha_j}, y)|^2$ es monótona creciente y acotada, esta converge a un limite finito cuando $N \rightarrow \infty$. Sea $y_n = \sum_{j=1}^N (x_{\alpha_j}, y) x_{\alpha_j}$. Entonces para $n > m$ tenemos que:

$$\|y_n - y_m\|^2 = \left\| \sum_{j=m+1}^n (x_{\alpha_j}, y) x_{\alpha_j} \right\|^2 = \sum_{j=m+1}^n |(x_{\alpha_j}, y)|^2$$

por tanto $\{y_n\}$ es una sucesión de Cauchy que converge a algún $y' \in \mathcal{H}$.

Observemos que:

$$(y - y', x_{\alpha l}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(y - \sum_{j=1}^n (x_{\alpha_j}, y) x_{\alpha_j}, x_{\alpha l} \right) = (y, x_{\alpha l}) - (y, x_{\alpha l}) = 0$$

Y si $\alpha \neq \alpha_l \forall l$, tenemos que:

$$(y - y', x_\alpha) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(y - \sum_{j=1}^n (x_{\alpha_j}, y), x_\alpha \right) = 0$$

Por tanto $y - y'$ es ortogonal a todas las x_α en \mathcal{S} . Ya que \mathcal{S} es un sistema ortonormal completo tenemos que $y - y' = 0$. Entonces:

$$y = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n (x_{\alpha_j}, y) x_{\alpha_j}$$

Mas aun,

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left\| y - \sum_{j=1}^n (x_{\alpha_j}, y) x_{\alpha_j} \right\|^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\|y\|^2 - \sum_{j=1}^n |(x_{\alpha_j}, y)|^2 \right) \\ &= \|y\|^2 - \sum_{\alpha \in A} |(x_\alpha, y)|^2 \end{aligned}$$

Ahora, sea $\{C_\alpha\}_{\alpha \in A} \subset \mathbb{C}$, tal que, $\sum_{\alpha \in A} |C_\alpha|^2 < \infty$. Entonces $C_\alpha \neq 0$, a lo mas para una cantidad numerable de $\alpha \in A$, las cuales ordenamos de alguna manera $\alpha_1, \alpha_2, \dots$; sea $y_n = \sum_{i=1}^n C_{\alpha_i} x_{\alpha_i}$, luego:

$$\|y_n - y_m\| = \left\| \sum_{i=m+1}^n C_{\alpha_i} x_{\alpha_i} \right\| = \sum_{i=m+1}^n |C_{\alpha_i}|^2$$

Por tanto, $\{y_n\}$ es una sucesión de Cauchy en \mathcal{H} y ya que este es completo existe $y \in \mathcal{H}$, tal que:

$$y = \lim_{n \rightarrow \infty} y_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n C_{\alpha_i} x_{\alpha_i} = \sum_{\alpha \in A} C_\alpha x_\alpha$$

□

Ahora describiremos un procedimiento muy útil para construir un conjunto ortonormal a partir de una sucesión arbitraria de vectores linealmente independientes, conocido como el proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt.

Sea u_1, u_2, \dots una sucesión de vectores linealmente independientes y definamos:

$$\begin{aligned} w_1 &= u_1 \\ v_1 &= w_1 / \|w_1\| \\ w_2 &= u_2 - (v_1, u_2) v_1 \\ &\dots \\ w_n &= u_n - \sum_{k=1}^{n-1} (v_k, u_n) v_k \\ v_n &= w_n / \|w_n\| \\ &\dots \end{aligned}$$

La familia $\{v_j\}$ es un conjunto ortonormal y tiene la propiedad de que para todo m , $\{u_j\}_{j=1}^m$ y $\{v_j\}_{j=1}^m$, generan el mismo espacio vectorial.

Definición 2.23. Diremos que un espacio métrico es **separable** si contiene un conjunto denso numerable.

Muchos de los espacios de Hilbert que surgen en la práctica resultan ser separables (tal es el caso de $L^2(\mathbb{R}^n)$ como veremos más adelante). El siguiente teorema caracteriza a este tipo de espacios.

Teorema 2.24. Un espacio de Hilbert \mathcal{H} es separable, si y solo si, tiene una base ortonormal numerable.

Demostración

Supongamos que \mathcal{H} es separable. Sea $\{x_n\}$ un conjunto denso numerable. Desechando algunos de los x_n podemos obtener una subcolección de vectores linealmente independientes $\{x_{n_l}\}$, cuyo conjunto de combinaciones lineales finitas, $\text{span}(\{x_{n_l}\})$ es el mismo que el del conjunto completo $\{x_n\}$; por tanto $\text{span}(\{x_{n_l}\})$ es denso en \mathcal{H} . Aplicando el proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt a la subcolección $\{x_{n_l}\}$ obtenemos un sistema ortonormal completo numerable. †

Sea $\{y_n\}$ una base ortonormal numerable del espacio de Hilbert \mathcal{H} . Entonces por el teorema 2.22, el conjunto de las combinaciones lineales finitas con coeficientes racionales de las y_n es denso en \mathcal{H} y ya que este conjunto es numerable, \mathcal{H} es separable. □

Hay que notar que en el caso separable, el proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt nos permite construir una base ortonormal sin tener que usar el lema de Zorn.

En lo siguiente supondremos que todos los espacios de Hilbert \mathcal{H} con los que estemos trabajando son separables, es decir, supondremos que tienen una base ortonormal numerable.

2.3. Operadores lineales no acotados en espacios de Hilbert

Al conjunto de todos los operadores lineales acotados (en el sentido del capítulo 1) de la forma $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ la denotamos como $B(\mathcal{H})$.

Si $T \in B(\mathcal{H})$, entonces este operador está definido en todo el espacio de Hilbert \mathcal{H} y existe un número real $C > 0$ tal que:

$$\|Tx\| \leq C \|x\|, \quad \forall x \in \mathcal{H} \quad (2.7)$$

Definimos la norma de T como:

$$\|T\| = \sup_{\|\hat{x}\|=1} \|T\hat{x}\|$$

la norma del operador T , $\|T\|$ resulta ser la constante C más pequeña que cumple con (2.7).

Lo anterior es similar a la discusión sobre operadores lineales acotados del capítulo 1, ya que como hemos visto todo espacio de Hilbert es un espacio de Banach, sin embargo es importante tener en mente los conceptos anteriores al momento de hablar de los operadores no acotados para poder distinguir las diferencias y limitaciones que estos últimos tienen.

Sea $D \subset \mathcal{H}$ un subconjunto lineal de \mathcal{H} y sea $T : D \rightarrow \mathcal{H}$ una función lineal, entonces T es un operador lineal de \mathcal{H} . Si sucede que:

$$\sup_{\hat{x} \in D, \|\hat{x}\|=1} \|T\hat{x}\| < \infty$$

entonces T es un operador acotado en su dominio D . De lo contrario nos referiremos a T simplemente como un operador no acotado en \mathcal{H} .

Al dominio D del operador T , también lo denotamos como $D(T)$.

En $D(T)$ definimos el producto interno $(\cdot, \cdot)_T$ como:

$$(x, y)_T = (x, y) + (Tx, Ty), \quad \forall x, y \in D(T)$$

bajo este producto interno $D(T)$ es un espacio pre Hilbert, esto es, un espacio con producto interno, no necesariamente completo bajo la norma inducida:

$$\|x\|_T^2 = \|x\|^2 + \|Tx\|^2, \quad \forall x \in D(T)$$

Definimos al conjunto:

$$N(T) = \{x \in D(T) \mid Tx = 0\}$$

y nos referimos a este como el *núcleo de T* . Tal y como sucede en el álgebra lineal, T es invertible, si y solo si, $N(T) = \{0\}$. Mas aun, la inversa de T es un operador acotado en su dominio (el rango de T), si y solo si, existe $C > 0$ tal que:

$$\|Tx\| \geq C \|x\|, \quad \forall x \in D(T)$$

Ahora, sean T_1 y T_2 operadores lineales de H . Diremos que $T_1 = T_2$, si y solo si:

$$D(T_1) = D(T_2)$$

y

$$T_1x = T_2x, \quad \forall x \in D(T_1)$$

Si sucede que:

$$D(T_1) \subset D(T_2)$$

y

$$T_1x = T_2x, \quad \forall x \in D(T_1)$$

entonces diremos que T_2 es una extensión de T_1 . Esto lo denotamos como $T_1 \subset T_2$.

2.4. Productos tensoriales de espacios de Hilbert

En esta sección estudiaremos el producto tensorial $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ de dos espacios de Hilbert \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 . Sean $\varphi_1 \in \mathcal{H}_1$ y $\varphi_2 \in \mathcal{H}_2$ y denotemos por $\varphi_1 \otimes \varphi_2$ a la forma bilinear conjugada, que actúa sobre $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ mediante:

$$(\varphi_1 \otimes \varphi_2)\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = (\psi_1, \varphi_1) (\psi_2, \varphi_2)$$

en donde $\psi_1 \in \mathcal{H}_1$ y $\psi_2 \in \mathcal{H}_2$.

Sea \mathcal{E} el conjunto de combinaciones lineales finitas de tales formas bilineales conjugadas; definimos un producto interno (\cdot, \cdot) en \mathcal{E} como:

$$(\varphi \otimes \psi, \eta \otimes \mu) = (\varphi, \eta) (\psi, \mu)$$

y lo extendemos a todo \mathcal{E} por linealidad.

Proposición 2.25. *La función (\cdot, \cdot) esta bien definida y es definida positiva.*

Demostración

Para demostrar que (\cdot, \cdot) esta bien definida, debemos probar que (λ, λ') no depende de la combinación lineal finita que se use para expresar a λ y a λ' . Para hacer esto es suficiente mostrar que si μ es una suma finita la cual da como resultado a la cero forma, entonces $(\eta, \mu) = 0$, para toda $\eta \in \mathcal{E}$. Para ver que esto se cumple sea, $\eta = \sum_{i=1}^N c_i (\varphi_i, \psi_i)$, entonces, por la linealidad del (\cdot, \cdot) :

$$\begin{aligned} (\eta, \mu) &= \left(\sum_{i=1}^N c_i (\varphi_i, \psi_i), \mu \right) \\ &= \sum_{i=1}^N c_i \mu \langle \varphi_i, \psi_i \rangle = 0 \end{aligned}$$

Ya que μ es la cero forma. Por tanto (\cdot, \cdot) esta bien definida.

Ahora supongamos que $\lambda = \sum_{k=1}^M d_k (\eta_k \otimes \mu_k)$. Luego $\{\eta_k\}_{k=1}^M$ y $\{\mu_k\}_{k=1}^M$ generan a los sub espacios $M_1 \subset \mathcal{H}_1$ y $M_2 \subset \mathcal{H}_2$ respectivamente. Si $\{\varphi_j\}_{j=1}^{N_1}$ y $\{\psi_l\}_{l=1}^{N_2}$ son bases ortonormales para M_1 y M_2 , podemos expresar a cada η_k en términos de la base $\{\varphi_j\}_{j=1}^{N_1}$ y cada μ_k en términos de la base $\{\psi_l\}_{l=1}^{N_2}$, obteniendo:

$$\lambda = \sum_{j=1}^{M_1} \sum_{l=1}^{M_2} c_{jl} (\varphi_j \otimes \psi_l)$$

pero,

$$\begin{aligned} (\lambda, \lambda) &= \left(\sum_{j,l} c_{jl} (\varphi_j \otimes \psi_l), \sum_{i,m} c_{im} (\varphi_i \otimes \psi_m) \right) \\ &= \sum_{j,l} \overline{c_{jl}} c_{im} (\varphi_j, \varphi_i) (\psi_l, \psi_m) = \sum_{j,l} |c_{jl}|^2 \end{aligned}$$

entonces si $(\lambda, \lambda) = 0$, todas las $c_{jl} = 0$ y λ es la cero forma. Por tanto (\cdot, \cdot) es positiva definida.

Definición 2.26. *Definimos a $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ como el espacio que resulta de completar a \mathcal{E} bajo el producto interno (\cdot, \cdot) definido anteriormente. $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ es llamado el **producto tensorial** de \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 .*

Proposición 2.27. *Si $\{\varphi_k\}$ y $\{\psi_l\}$ son bases ortonormales de \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 respectivamente, entonces $\{\varphi_k \otimes \psi_l\}$ es una base ortonormal para $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.*

Demostración

Para simplificar la notación consideraremos el caso en el que \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 son de dimensión infinita y separables. Los demás casos son similares. Por la definición del producto interno en $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, es claro que el conjunto $\{\varphi_k \otimes \psi_l\}$ es ortonormal y por tanto solo debemos mostrar que \mathcal{E} esta contenido en el espacio cerrado S , el cual es generado por $\{\varphi_k \otimes \psi_l\}$.

Sea $\varphi \otimes \psi \in \mathcal{E}$. ya que $\{\varphi_k\}$ y $\{\psi_l\}$ son bases, $\varphi = \sum_k c_k \varphi_k$ y $\psi = \sum_l d_l \psi_l$, donde $\sum_k |c_k|^2 < \infty$ y $\sum_l |d_l|^2 < \infty$, entonces, $\sum_{k,l} |c_k d_l|^2 < \infty$. Luego por el teorema 2.22, existe un vector $\eta = \sum_{k,l} c_k d_l (\varphi_k \otimes \psi_l)$ en S . Entonces, es claro que:

$$\left\| \varphi \otimes \psi - \sum_{k < M, l < N} c_k d_l \varphi_k \otimes \psi_l \right\| \rightarrow 0$$

cuando $M, N \rightarrow \infty$.

□

En este punto ya estamos listos para la introducción de un espacio de Hilbert concreto, a saber el espacio de funciones de cuadrado integrable $L^2(\mathbb{R}^n)$ y algunas de sus variantes que utilizaremos mas adelante en el desarrollo del texto.

Capítulo 3

El espacio $L^2(\mathbb{R}^n)$

Denotamos por $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ al espacio de funciones medibles, en el sentido de Lebesgue, que van de \mathbb{R}^n a \mathbb{C} , para las cuales:

$$\int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} < \infty$$

en donde, $\int_{\mathbb{R}^n} d\mathbf{x}$ denota a la integral de Lebesgue sobre \mathbb{R}^n . Debemos notar que $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ es un espacio lineal sobre los números complejos, ya que:

$$0 \leq |f + g| \leq 4 \max\{|f|, |g|\}^2 \leq 4 \max\{|f|^2, |g|^2\} \leq 4(|f|^2 + |g|^2)$$

y que,

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\alpha f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = |\alpha|^2 \int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

Esperaríamos poder hacer de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ un espacio de Hilbert bajo un producto escalar escogido adecuadamente, sin embargo la integral de Lebesgue presenta el siguiente detalle técnico referente a cuando la integral del modulo cuadrado de una función es cero.

Lema 3.1. *Sea f una función medible de \mathbb{R}^n a \mathbb{C} . Entonces:*

$$\int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 0$$

si y solo si, $f(\mathbf{x}) = 0$ en casi todo punto.

Demostración

Recordemos que una propiedad es valida *en casi todo punto* si esta es valida solamente en un conjunto con medida de Lebesgue cero.

Sea $A = \left\{ \mathbf{x} \mid |f(\mathbf{x})|^2 > 0 \right\}$ y definamos a $A_n = \left\{ \mathbf{x} \mid |f(\mathbf{x})|^2 > \frac{1}{n} \right\}$, $\forall n \in \mathbb{N}$. Mostremos que $A = \bigcup_n A_n$. Sea $\mathbf{x} \in A_n$ entonces $|f(\mathbf{x})|^2 > \frac{1}{n} > 0$, implicando que $\mathbf{x} \in A$ y que $A_n \subset A$, $\forall n \in \mathbb{N}$; por tanto $\bigcup_n A_n \subset A$.

Sea $\mathbf{x} \in A$ entonces existe $\epsilon > 0$, tal que $|f(\mathbf{x})|^2 > \epsilon > 0$ y ya que $\frac{1}{n} \rightarrow 0$, existe $N \in \mathbb{N}$ tal que, $|f(\mathbf{x})|^2 > \epsilon > \frac{1}{n} > 0$, $\forall n > N$; así $\mathbf{x} \in A_n \forall n > N$ implicando que $\mathbf{x} \in \bigcup_n A_n$. Por tanto $A \subset \bigcup_n A_n$. Luego,

$$0 \leq \int_{A_n} |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \leq \int_A |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 0$$

luego tenemos que,

$$0 \leq \frac{1}{n} m(A_n) \leq \int_{A_n} \frac{1}{n} d\mathbf{x} \leq \int_{A_n} |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 0$$

lo cual implica que $m(A_n) = 0$ para toda $n \in \mathbb{N}$. Luego para la medida de A tenemos que:

$$0 \leq m(A) = m(\cup_n A_n) \leq \sum_n m(A_n) = 0$$

por tanto $m(A) = 0$.

Si $|f(\mathbf{x})| = 0$ en casi todo punto, es claro que:

$$\int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 0$$

□

Definimos la función $(\cdot, \cdot) : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n) \times \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{C}$, dada por:

$$(f, g) = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) \overline{g(\mathbf{x})} d\mathbf{x} \quad (3.1)$$

Observemos que:

$$(f, f) = \int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

La siguiente proposición muestra que el dominio de (\cdot, \cdot) es en efecto todo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n) \times \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$.

Proposición 3.2. *La función (\cdot, \cdot) esta bien definida en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n) \times \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$.*

Demostración

Sean $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ y $g \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$. Consideremos el modulo cuadrado de $(f - g)$,

$$|f - g|^2 = \overline{(f - g)} (f - g) = |f|^2 - 2 \operatorname{Re}(f \bar{g}) + |g|^2 \geq 0$$

esto implica que,

$$2 \operatorname{Re}(f \bar{g}) \leq |f|^2 + |g|^2$$

sea, $\mathbf{x}_1 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid 0 \leq \operatorname{Re}(f \bar{g})\}$, luego tenemos que,

$$0 \leq \int_{\mathbf{x}_1} \operatorname{Re}(f \bar{g}) d\mathbf{x} \leq \int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} + \int_{\mathbb{R}^n} |g(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

Consideremos el modulo cuadrado de $(f + g)$,

$$|f + g|^2 = \overline{(f + g)} (f + g) = |f|^2 + 2 \operatorname{Re}(f \bar{g}) + |g|^2 \geq 0$$

esto implica que,

$$-2 \operatorname{Re}(f \bar{g}) \leq |f|^2 + |g|^2$$

sea, $\mathbf{x}_2 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \operatorname{Re}(f \bar{g}) < 0\}$, luego tenemos que,

$$0 \leq - \int_{\mathbf{x}_2} \operatorname{Re}(f \bar{g}) d\mathbf{x} \leq \int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} + \int_{\mathbb{R}^n} |g(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

Ahora consideremos el modulo cuadrado de $(f - ig)$,

$$\begin{aligned} |f - ig|^2 &= \overline{(f - ig)} (f - ig) = |f|^2 - 2 \operatorname{Re}(f \overline{ig}) + |g|^2 \\ &= |f|^2 - 2 \operatorname{Im}(f \bar{g}) + |g|^2 \geq 0 \end{aligned}$$

esto implica que,

$$2 \operatorname{Im}(f \bar{g}) \leq |f|^2 + |g|^2$$

sea, $\mathbf{x}_3 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid 0 \leq \operatorname{Im}(f \bar{g})\}$, luego tenemos que,

$$0 \leq \int_{\mathbf{x}_3} \operatorname{Im}(f \bar{g}) \, d\mathbf{x} \leq \int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x})|^2 \, d\mathbf{x} + \int_{\mathbb{R}^n} |g(\mathbf{x})|^2 \, d\mathbf{x}$$

consideremos el modulo cuadrado de $(f + ig)$,

$$\begin{aligned} |f + ig|^2 &= \overline{(f + ig)} (f + ig) = |f|^2 + 2 \operatorname{Re}(f \overline{ig}) + |g|^2 \\ &= |f|^2 + 2 \operatorname{Im}(f \bar{g}) + |g|^2 \geq 0 \end{aligned}$$

esto implica que,

$$-2 \operatorname{Im}(f \bar{g}) \leq |f|^2 + |g|^2$$

sea, $\mathbf{x}_4 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \operatorname{Im}(f \bar{g}) < 0\}$, luego tenemos que,

$$0 \leq - \int_{\mathbf{x}_4} \operatorname{Im}(f \bar{g}) \, d\mathbf{x} \leq \int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x})|^2 \, d\mathbf{x} + \int_{\mathbb{R}^n} |g(\mathbf{x})|^2 \, d\mathbf{x}$$

Luego,

$$\begin{aligned} 0 &\leq \left| \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) \overline{g(\mathbf{x})} \, d\mathbf{x} \right| = \left| \int_{\mathbb{R}^n} \operatorname{Re}(f \bar{g}) \, d\mathbf{x} + i \int_{\mathbb{R}^n} \operatorname{Im}(f \bar{g}) \, d\mathbf{x} \right| \\ &\leq \left| \int_{\mathbb{R}^n} \operatorname{Re}(f \bar{g}) \, d\mathbf{x} \right| + \left| \int_{\mathbb{R}^n} \operatorname{Im}(f \bar{g}) \, d\mathbf{x} \right| \\ &= \int_{\mathbf{x}_1} \operatorname{Re}(f \bar{g}) \, d\mathbf{x} - \int_{\mathbf{x}_2} \operatorname{Re}(f \bar{g}) \, d\mathbf{x} + \int_{\mathbf{x}_3} \operatorname{Im}(f \bar{g}) \, d\mathbf{x} - \int_{\mathbf{x}_4} \operatorname{Im}(f \bar{g}) \, d\mathbf{x} \\ &\leq 4 \left[\int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x})|^2 \, d\mathbf{x} + \int_{\mathbb{R}^n} |g(\mathbf{x})|^2 \, d\mathbf{x} \right] < \infty \end{aligned}$$

Por tanto, $|(f, g)| < \infty$, para toda $f, g \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$. así la función (\cdot, \cdot) esta bien definida en todo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n) \times \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$. □

En este punto debemos hacer notar que por las propiedades de linealidad de la integral de Lebesgue, la función (\cdot, \cdot) cumple con las propiedades 2 a 4 de la definición de producto interno, sin embargo por el lema 3.1 es inmediato observar que esta falla en ser positiva definida, ya que si $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ y $(f, f) = 0$, solo podemos asegurar que $f(\mathbf{x}) = 0$ en casi todo punto y no en todo \mathbb{R}^n . Es aquí cuando podemos descartar a la función (\cdot, \cdot) como un producto interno de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ y empezar a definir otra que si cumpla con las propiedades requeridas o podríamos quedarnos con esta y cambiar a un espacio en donde cumpla todas las propiedades del producto interno. Para empezar a hacer esto ultimo establecemos la siguiente proposición.

Proposición 3.3. *Digamos que dos funciones f y g de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ están relacionadas $f \sim g$, si y solo si, $f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})$ en casi todo punto (C.T.P.). Entonces la relación $f \sim g$ es de equivalencia.*

Demostración

Recordemos que para probar que la relación \sim es de equivalencia, hay que verificar que esta posea las propiedades de Reflexividad, Simetría y Transitividad.

Sean $f, g, h \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ tales que, $f \sim g$ y $g \sim h$. Entonces:

1. Ya que $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$ en todo punto, $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$ en C.T.P; por tanto $f \sim f$. así \sim es reflexiva.
2. $f \sim g \Leftrightarrow f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})$ en C.T.P. $\Leftrightarrow g(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$ en C.T.P. $\Leftrightarrow g \sim f$. así \sim es simétrica.
3. $f = g$ en C.T.P. y $g = h$ en C.T.P. $\Leftrightarrow f - g = 0$ en C.T.P. y $h - g = 0$ en C.T.P. implica que $f - g = g - h$ en C.T.P. entonces $f - g = g - h$ en C.T.P. y por tanto $f = h$ C.T.P. así $f \sim h$.

□

Es fácil ver que la relación de equivalencia \sim también se puede caracterizar como: $f \sim g \Leftrightarrow f - g = 0$ en C.T.P. ya que,

$$f \sim g \Leftrightarrow f = g \text{ C.T.P.} \Leftrightarrow f - g = 0 \text{ C.T.P.}$$

Sea,

$$\mathcal{N}(\mathbb{R}^n) = \{f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n) \mid f(\mathbf{x}) = 0 \text{ en C.T.P.}\}$$

Entonces $\mathcal{N}(\mathbb{R}^n)$ es un sub espacio lineal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$, tal como lo establece la siguiente proposición.

Proposición 3.4. $\mathcal{N}(\mathbb{R}^n) = \{f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n) \mid f(\mathbf{x}) = 0 \text{ en C.T.P.}\}$ es un sub espacio lineal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$.

Demostración

Es claro que la función $\mathcal{O}(\mathbf{x}) = 0 \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, es un elemento de $\mathcal{N}(\mathbb{R}^n)$.

Sean $f, g \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ y sean,

$$\mathbf{x}_f = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{x}) \neq 0\}$$

$$\mathbf{x}_g = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g(\mathbf{x}) \neq 0\}$$

$$\mathbf{x}_+ = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x}) \neq 0\}$$

Es claro que $m(\mathbf{x}_f) = m(\mathbf{x}_g) = 0$. Sea $\mathbf{x} \in \mathbf{x}_+$ entonces $f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x}) \neq 0$; esto implica que $\mathbf{x} \in \mathbf{x}_f$ y/o $\mathbf{x} \in \mathbf{x}_g$ así $\mathbf{x} \in \mathbf{x}_f \cup \mathbf{x}_g$ y por tanto $\mathbf{x}_+ \subset \mathbf{x}_f \cup \mathbf{x}_g$. Luego,

$$0 \leq m(\mathbf{x}_+) \leq m(\mathbf{x}_f \cup \mathbf{x}_g) \leq m(\mathbf{x}_f) + m(\mathbf{x}_g) = 0$$

y por tanto $f + g \in \mathcal{N}(\mathbb{R}^n)$.

Sea $\alpha \in \mathbb{C}$; es claro que $\mathbf{x}_f = \mathbf{x}_{\alpha f}$ y por tanto $\alpha f \in \mathcal{N}(\mathbb{R}^n)$.

□

Ahora ya que hemos visto que la relación \sim es de equivalencia y que $\mathcal{N}(\mathbb{R}^n)$ es un sub espacio de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ podemos denotar sin ambigüedad al espacio cociente:

$$L^2(\mathbb{R}^n) = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)/\mathcal{N}(\mathbb{R}^n)$$

cuyos elementos son las clases de equivalencia $[f]$ de la relación de equivalencia \sim . De la teoría del algebra lineal sabemos que $L^2(\mathbb{R}^n)$ es de hecho un espacio vectorial (en este caso sobre el campo de los complejos) bajo las operaciones de suma y multiplicación por escalar definidas como:

$$[f] + [g] := [f + g]$$

$$\alpha[f] := [\alpha f]$$

Por las propiedades simétrica y transitiva de la relación de equivalencia \sim , las clases de equivalencia $[f + g]$ y $[\alpha f]$ son no vacías y no dependen de los representantes de clase f y g . Notemos que $\mathcal{N}(\mathbb{R}^n) = [\mathcal{O}]$ y que $[\mathcal{O}]$ es el neutro aditivo del espacio $L^2(\mathbb{R}^n)$ en donde $\mathcal{O}(\mathbf{x}) = 0, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. también debemos observar que si $f_1, f_2 \in [f], f_1(\mathbf{x}) = f_2(\mathbf{x})$ en C.T.P. y entonces:

$$\int_{\mathbb{R}^n} f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} f_2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

Definimos la función,

$$(\cdot, \cdot)_{L^2} : L^2(\mathbb{R}^n) \times L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{C}$$

dada por,

$$([f], [g])_{L^2} = (f, g)$$

en donde $f, g \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ son representantes de las clases de equivalencia $[f]$ y $[g]$. El siguiente lema establece que $L^2(\mathbb{R}^n)$ es un espacio con producto interno.

Lema 3.5. *La función $(\cdot, \cdot)_{L^2}$ es un producto interno en $L^2(\mathbb{R}^n)$.*

Demostración

Primero debemos de mostrar que la función $(\cdot, \cdot)_{L^2}$ esta bien definida en $L^2(\mathbb{R}^n) \times L^2(\mathbb{R}^n)$ en el sentido de que el valor $([f], [g])_{L^2} = (f, g)$ no depende de los representantes f y g de las clases de equivalencia, si no de las clases mismas.

Sean $f_1, f_2 \in [f]$ y $g_1, g_2 \in [g]$. Ya que $g_1(\mathbf{x}) = g_2(\mathbf{x})$ en C.T.P. entonces, $\bar{g}_1(\mathbf{x}) = \bar{g}_2(\mathbf{x})$ C.T.P. luego,

$$f_1(\mathbf{x}) \bar{g}_1(\mathbf{x}) = f_1(\mathbf{x}) \bar{g}_2(\mathbf{x}) \text{ en C.T.P.}$$

Por la proposición 3.2 estos productos de funciones están en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$, esto implica que $f_1(\mathbf{x}) \bar{g}_1(\mathbf{x}) \sim f_1(\mathbf{x}) \bar{g}_2(\mathbf{x})$. Por otro lado ya que $f_1(\mathbf{x}) = f_2(\mathbf{x})$ en C.T.P. entonces,

$$f_1(\mathbf{x}) \bar{g}_2(\mathbf{x}) = f_2(\mathbf{x}) \bar{g}_2(\mathbf{x}) \text{ en C.T.P.}$$

implicando que $f_1(\mathbf{x}) \bar{g}_2(\mathbf{x}) \sim f_2(\mathbf{x}) \bar{g}_2(\mathbf{x})$.

Luego por la transitividad de la relación de equivalencia \sim tenemos que $f_1(\mathbf{x}) \bar{g}_1(\mathbf{x}) \sim f_2(\mathbf{x}) \bar{g}_2(\mathbf{x})$ implicando que $f_1(\mathbf{x}) \bar{g}_1(\mathbf{x}) = f_2(\mathbf{x}) \bar{g}_2(\mathbf{x})$ en C.T.P. y por tanto,

$$\int_{\mathbb{R}^n} f_1(\mathbf{x}) \bar{g}_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} f_2(\mathbf{x}) \bar{g}_2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

así, $([f], [g])_{L^2}$ no depende de los representantes f_1, f_2 y g_1, g_2 .

Por el argumento anterior y por la linealidad de la integral de Lebesgue, solo debemos verificar que la función $(\cdot, \cdot)_{L^2}$ es positiva definida. Sea $[f] \in L^2(\mathbb{R}^n)$ entonces $|f(\mathbf{x})|^2 \geq 0 \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ implicando que,

$$([f], [f])_{L^2} = (f, f) = \int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \geq 0$$

Es claro que $([\mathcal{O}], [\mathcal{O}])_{L^2} = \int_{\mathbb{R}^n} \mathcal{O}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0$. Por otro lado supongamos que $([h], [h])_{L^2} = 0$, entonces:

$$([h], [h])_{L^2} = (h, h) = \int_{\mathbb{R}^n} |h(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 0$$

esto implica que, $h(\mathbf{x}) = 0$ en C.T.P. (ya que el modulo complejo es una función positiva definida). Luego $h \sim \mathcal{O}$ haciendo que $\mathcal{O} \in [h]$ pero ya que las clases de equivalencia son disjuntas entre ellas, tenemos que $[h] = [\mathcal{O}]$.

Por tanto la función $(\cdot, \cdot)_{L^2}$ es un producto interno de $L^2(\mathbb{R}^n)$.

□

Aunque estrictamente hablando $L^2(\mathbb{R}^n)$ esta formado por clases de equivalencia de funciones, en la practica y por conveniencia de notación, a los elementos de este espacio se les sigue llamando funciones. Sin embargo, se debe de notar que para $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ el valor $f(\mathbf{x})$ no esta bien definido, al menos que exista un representante continuo de la clase de equivalencia y que funciones continuas diferentes estén en clases de equivalencia distintas, pero esto sucede de esta forma con la medida de Lebesgue. Mas adelante en esta sección estableceremos un teorema que aclara este hecho.

Por el teorema 2.7 tenemos que $L^2(\mathbb{R}^n)$ es un espacio normado bajo la norma:

$$\|f\|_{L^2} = \sqrt{(f, f)_{L^2}}$$

En particular, se dice que una función compleja es **esencialmente acotada**, si existe un número $M < \infty$, tal que $|f(\mathbf{x})| < M$, en C.T.P. a esta constante se le conoce como el **supremo esencial** de f y se denota como $M = \text{ess-sup}(f)$. Es fácil ver que si para un elemento de una clase de equivalencia $[f] \in L^2(\mathbb{R}^n)$, este número existe, entonces existe para todos y mas aun este número es igual para todas las funciones en dicha clase.

Ahora mostraremos que en efecto $L^2(\mathbb{R}^n)$ es un espacio de Hilbert.

Teorema 3.6. *El espacio $L^2(\mathbb{R}^n)$ es completo bajo la norma $\|\cdot\|_{L^2} = \sqrt{(\cdot, \cdot)_{L^2}}$*

Demostración

Sea $\{f_n\} \subset L^2(\mathbb{R}^n)$ una sucesión de Cauchy, entonces es suficiente mostrar que una subsucesión de esta es convergente; así podemos eliminar algunos términos de la sucesión original para obtener otra tal que:

$$\|f_{n+1} - f_n\|_{L^2} \leq \frac{1}{2^n}$$

Sea $g_n = f_n - f_{n-1}$ (en donde $f_0 = 0$). Definimos a la función:

$$G(x) = \sum_{k=1}^{\infty} |g_k(x)|$$

luego observamos que:

$$\left\| \sum_{k=1}^n |g_k(x)| \right\|_{L^2} \leq \sum_{k=1}^n \|g_k(x)\| \leq \|f_1\|_{L^2} + \frac{1}{2} \quad (\forall n \in \mathbb{N})$$

así por el teorema de convergencia monótona [19] tenemos que $G(x) \in L^2(\mathbb{R}^n)$. En particular esto muestra que $G(x) < \infty$ en C.T.P. y también que la suma,

$$\sum_{n=1}^{\infty} g_n(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x)$$

es absolutamente convergente en C.T.P.

Sea $f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x)$; ya que $|f(\mathbf{x}) - f_n(\mathbf{x})|^2$ converge a cero en C.T.P. y $|f(\mathbf{x}) - f_n(\mathbf{x})|^2 \leq 4G^2(x)$ tenemos por el teorema de convergencia dominada [19] que $\|f - f_n\|_{L^2} \rightarrow 0$.

□

Es importante observar que $L^2(\mathbb{R}^n)$ es un espacio de Hilbert separable. Para mostrar esto primero debemos de recordar algunos conceptos básicos de la topología de \mathbb{R}^n y la medida de Lebesgue.

Sea \mathcal{O} la familia de los conjuntos abiertos de \mathbb{R}^n . Una familia $\mathcal{B} \subseteq \mathcal{O}$ es una **base** de la topología de \mathbb{R}^n si para cada $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ y cada vecindad $V(\mathbf{x})$, hay algún conjunto $O \in \mathcal{B}$ tal que, $x \in O \subseteq V(x)$. Ya que cualquier conjunto abierto \tilde{O} es vecindad de cada uno de sus puntos, tenemos que:

$$\tilde{O} = \bigcup_{\tilde{O} \supseteq O \in \mathcal{B}} O$$

Es fácil ver que el conjunto de las bolas abiertas con centro racional (vectores de \mathbb{R}^n con coordenadas racionales) y con radio $\frac{1}{n}$ ($n \in \mathbb{N}$) forman una base numerable de la topología de \mathbb{R}^n . Recordemos que un espacio topológico con una base numerable es conocido como un **espacio segundo numerable**.

también recordemos que si $A \in \Sigma$, en donde Σ denota a la sigma algebra de los conjuntos medibles en \mathbb{R}^n , entonces:

$$m(A) = \inf_{A \subseteq O} m(O)$$

donde $O \in \mathcal{O}$. La propiedad anterior hace de la medida de Lebesgue una **medida de Borel exterior regular**.

Sea $W \subset V$ un subconjunto de un espacio vectorial V . Recordemos que el conjunto W es **total** si el conjunto de sus combinaciones lineales finitas, $\text{Span}(W)$ es denso en V .

Lema 3.7. *El espacio $L^2(\mathbb{R}^n)$ es separable.*

Demostración

Por construcción de la integral de Lebesgue, el conjunto de todas las funciones características

$$\chi_\Sigma = \{\chi_A(\mathbf{x}) | A \in \Sigma, m(A) < \infty\}$$

es un conjunto total en $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Sea $A \in \Sigma$ fijo. Ya que la medida de Lebesgue es exterior regular, existe una sucesión decreciente de conjuntos abiertos $\{O_n\}$ tal que, $m(O_n) \rightarrow m(A)$ cuando $n \rightarrow \infty$. Ya que $m(A) < \infty$ podemos suponer sin restricción que $m(O_n) < \infty \forall n$. De esta forma,

$$m(O_n \setminus A) = m(O_n) - m(A) \rightarrow 0$$

cuando $n \rightarrow \infty$. Luego, el teorema de convergencia dominada de Lebesgue implica que:

$$\|\chi_A - \chi_{O_n}\|_{L^2} \rightarrow 0$$

cuando $n \rightarrow \infty$. así, hemos encontrada una sucesión de funciones características de conjuntos abiertos que converge en norma L^2 a la función característica de un conjunto medible. Luego, el conjunto de las funciones características $\chi_{op} = \{\chi_O | O \in \mathcal{O}, m(O) < \infty\}$ es un conjunto denso en χ_Σ y por tanto es total en $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Ya que \mathbb{R}^n es un espacio segundo numerable, podemos encontrar una base numerable \mathcal{B} para su topología. Entonces cada conjunto abierto O , se puede escribir como:

$$O = \bigcup_{j=1}^{\infty} \tilde{O}_j$$

con $\tilde{O}_j \in \mathcal{B}$. Mas aun, considerando el conjunto de todas las uniones finitas de elementos de \mathcal{B} , podemos asumir que $\bigcup_{j=1}^n \tilde{O}_j \in \mathcal{B}$. así existe una sucesión creciente $\tilde{O}_n \subseteq \tilde{O}_{n+1} \rightarrow O$ con $\tilde{O}_n \in \mathcal{B}$. Por el teorema de convergencia monótona $\|\chi_O - \chi_{\tilde{O}_n}\|_{L^2} \rightarrow 0$ cuando $n \rightarrow \infty$. así el conjunto de las funciones características $\chi_{\mathcal{B}} = \{\chi_{\tilde{O}} | \tilde{O} \in \mathcal{B}\}$ es numerable y denso en χ_{op} y por tanto es total en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Luego el conjunto de todas las combinaciones lineales finitas racionales (escalares complejos con parte real e imaginaria racional) de $\chi_{\mathcal{B}}$ es numerable y denso en $\text{Span}(\chi_{\mathcal{B}})$ y por lo tanto también es denso en $L^2(\mathbb{R}^n)$. □

Por el teorema 2.24 el resultado anterior implica que $L^2(\mathbb{R}^n)$ posee una base ortonormal numerable.

Ahora mostraremos que el conjunto de las funciones continuas con soporte compacto es denso en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Pero para esto primero debemos recordar algunos detalles acerca de la topología de \mathbb{R}^n y la medida de Lebesgue.

Recordemos que \mathbb{R}^n es un espacio **localmente compacto**, es decir, cada punto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tiene una vecindad compacta (por ejemplo una bola cerrada con centro en \mathbf{x}).

también debemos de recordar que para \mathbb{R}^n podemos encontrar una cubierta numerable $\{X_j\}_{j=1}^{\infty}$ con $m(X_j) < \infty$, $\forall j$ (por ejemplo el conjunto de bolas con centro en el origen y radio $n \in \mathbb{N}$). Esto hace que la medida de Lebesgue en \mathbb{R}^n sea **sigma finita**.

así también, es preciso recordar que si $A \subset \Sigma$ entonces:

$$m(A) = \sup_{K \subseteq A} m(K)$$

en donde k denota un subconjunto compacto de \mathbb{R}^n . Esto hace que la medida de Lebesgue sea una **medida de Borel interior regular**.

Así también necesitamos establecer el siguiente resultado acerca de como construir una función continua con soporte compacto en \mathbb{R}^n .

Lema 3.8. (Urysohn) Sean C_1 y C_2 dos conjuntos de \mathbb{R}^n cerrados y disjuntos. Entonces existe una función continua $f : \mathbb{R}^n \rightarrow [0, 1]$ tal que, f es cero en C_1 y uno en C_2 .

Si C_1 es compacto entonces uno puede tomar a f con soporte compacto.

Demostración

Definimos a la función $dist(\mathbf{x}, C) : \mathbb{R}^n \rightarrow [0, \infty)$ donde $C \subset \mathbb{R}^n$ es cerrado, como:

$$dist(\mathbf{x}, C) := \inf_{\mathbf{x}_0 \in C} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\| = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|$$

para algún $\mathbf{x}^* \in C$ cuya existencia queda siempre asegurada ya que C es cerrado. Sea $\{\mathbf{x}_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathbb{R}^n$ tal que $\mathbf{x}_n \rightarrow \mathbf{x}_0$ cuando $n \rightarrow \infty$. Supongamos que:

$$dist(\mathbf{x}_0, C) = \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0^*\| \quad \mathbf{x}_0^* \in C$$

$$\text{dist}(\mathbf{x}_n, C) = \|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_n^*\| \quad \mathbf{x}_n^* \in C, \forall n \in \mathbb{N}$$

Luego, por la continuidad de la norma en \mathbb{R}^n ,

$$0 \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \text{dist}(\mathbf{x}_n, C) = \lim_{n \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_n^*\| \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_0^*\| = \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0^*\|$$

por otro lado,

$$0 \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0^*\| \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_n^*\| \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_n\| + \|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_n^*\| = \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_n\| + \text{dist}(\mathbf{x}_n, C)$$

Para toda $n \in \mathbb{N}$. Tomando el limite cuando $n \rightarrow \infty$ en la desigualdad anterior y utilizando el hecho de que $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_n\| = 0$, obtenemos:

$$0 \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0^*\| \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \text{dist}(\mathbf{x}_n, C)$$

por tanto, $\lim_{n \rightarrow \infty} \text{dist}(\mathbf{x}_n, C) = \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0^*\| = \text{dist}(\mathbf{x}_0, C)$. Luego la función:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{\text{dist}(\mathbf{x}, C_1)}{\text{dist}(\mathbf{x}, C_1) + \text{dist}(\mathbf{x}, C_2)}$$

esta definida en \mathbb{R}^n , es continua y tiene valor cero en C_1 y uno en C_2 . Esto muestra la primera parte del teorema.

Ahora supongamos que C_1 es compacto. Observemos que existe un conjunto abierto O tal que \overline{O} es compacto y $C_1 \subset O \subset \overline{O} \subset \mathbb{R}^n \setminus C_2$. De hecho para cada \mathbf{x} , hay una bola $B_\epsilon(\mathbf{x})$ tal que $\overline{B_\epsilon(\mathbf{x})}$ es compacto y $\overline{B_\epsilon(\mathbf{x})} \subset \mathbb{R}^n \setminus C_2$. Ya que C_1 es compacto un número finito de estas bolas cubren a C_1 y podemos hacer que la unión de estas bolas sea O . Ahora reemplazamos a C_2 por $\mathbb{R}^n \setminus \overline{O}$ en la función f .

□

Teorema 3.9. *El conjunto $C_c(\mathbb{R}^n)$ de funciones continuas con soporte compacto, es denso en $L^2(\mathbb{R}^n)$.*

Demostración

Sea χ_Σ como en la demostración del teorema anterior; sabemos que por construcción de la integral de Lebesgue que este conjunto es total en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Luego, ya que la medida de Lebesgue es interior regular el conjunto de funciones características $\chi_c = \{\chi_k \mid k \text{ es compacto}\}$ es denso en χ_Σ y por tanto es total en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Por tanto bastara con probar que χ_k se puede aproximar por funciones continuas. Ya que la medida de Lebesgue es exterior regular, para todo $\epsilon > 0$, existe un conjunto abierto $O \supset k$ tal que $m(O \setminus k) \leq \epsilon$. Por el lema de Urysohn existe una función f_ϵ con valor uno en k y valor cero fuera de O . Luego,

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\chi_k(\mathbf{x}) - f_\epsilon(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \int_{O \setminus k} |f_\epsilon(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \leq m(O \setminus k) \leq \epsilon$$

por tanto $\|f_\epsilon - \chi_k\| \rightarrow 0$.

□

3.1. El Producto tensorial $L^2(\mathbb{R}^n) \otimes L^2(\mathbb{R}^m)$

En esta sección discutiremos como la multiplicación de números complejo hace que el producto tensorial $L^2(\mathbb{R}^n) \otimes L^2(\mathbb{R}^m)$ surja de manera natural.

Consideremos a los espacios de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$ y $L^2(\mathbb{R}^m)$ con medidas de Lebesgue m_n y m_m respectivamente. Por el lema 3.7 existen bases numerables $\{\varphi_k(\mathbf{x})\}$ y $\{\psi_l(\mathbf{y})\}$ para $L^2(\mathbb{R}^n)$ y $L^2(\mathbb{R}^m)$ respectivamente. Luego, claramente el conjunto $\{\varphi_k(\mathbf{x}) \psi_l(\mathbf{y})\}$ es ortonormal en el espacio $L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m)$, en donde $m_n \cdot m_m$ es la medida en el espacio $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$. El hecho de que $\{\varphi_k(\mathbf{x}) \psi_l(\mathbf{y})\}$ es una base de este ultimo espacio, se puede ver mediante el siguiente argumento: Supongamos que $f(x, y) \in L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m)$ y que,

$$\iint_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m} \overline{f(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \varphi_k(\mathbf{x}) \psi_l(\mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y} = 0$$

para toda k y l . Por de teorema de Fubini podemos escribir,

$$\int_{\mathbb{R}^m} \left(\int_{\mathbb{R}^n} \overline{f(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \varphi_k(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right) \psi_l(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = 0$$

Ya que $\{\psi_l\}$ es una base de $L^2(\mathbb{R}^m)$ lo anterior implica que,

$$\int_{\mathbb{R}^n} \overline{f(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \varphi_k(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0$$

excepto en un conjunto $S_k \subset \mathbb{R}^m$ con $m_m(S_k) = 0$. Entonces para $\mathbf{y} \notin \bigcup_k S_k$, $\int_{\mathbb{R}^n} \overline{f(x, y)} \varphi_k(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0$, para toda k ; esto implica que $f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ para casi toda $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ en la medida m_n . Entonces $f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ para casi toda (\mathbf{x}, \mathbf{y}) en la medida $m_n \cdot m_m$ de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$. así, $\{\varphi_k(\mathbf{x}) \psi_l(\mathbf{y})\}$ es un conjunto ortonormal completo y por lo tanto una base para $L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m)$.

Por la proposición 2.27 tenemos que el conjunto $\{\varphi_k \otimes \psi_l\}$ es una base ortonormal del producto tensorial $L^2(\mathbb{R}^n) \otimes L^2(\mathbb{R}^m)$. Ahora, sea U un operador lineal tal que,

$$U : \varphi_k \otimes \psi_l \rightarrow \varphi_k(\mathbf{x}) \psi_l(\mathbf{y})$$

Es claro que U es una biyección entre la base de $L^2(\mathbb{R}^n) \otimes L^2(\mathbb{R}^m)$ y la de $L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m)$, luego U se puede extender de manera única a un operador lineal unitario entre estos dos espacios.

Notemos que si $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ y $g \in L^2(\mathbb{R}^m)$, entonces ya que U es lineal:

$$\begin{aligned} U(f \otimes g) &= U \left(\sum_k c_k \varphi_k \otimes \sum_l d_l \psi_l \right) \\ &= U \left(\sum_{kl} c_k d_l \varphi_k \otimes \psi_l \right) \\ &= \sum_{kl} c_k d_l \varphi_k(\mathbf{x}) \psi_l(\mathbf{y}) \\ &= f(\mathbf{x}) g(\mathbf{y}) \end{aligned}$$

Debido a esta propiedad se dice que $L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m)$ y $L^2(\mathbb{R}^n) \otimes L^2(\mathbb{R}^m)$ son *naturalmente isomorfos*. así, hemos demostrado el siguiente teorema:

Teorema 3.10. *Existe un único isomorfismo entre los espacios $L^2(\mathbb{R}^n) \otimes L^2(\mathbb{R}^m)$ y $L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m)$ tal que, $f \otimes g \rightarrow fg$.*

En la práctica por conveniencia, se suele omitir al isomorfismo anterior y simplemente se define el producto tensorial de dos elementos de $L^2(\mathbb{R}^n)$ y $L^2(\mathbb{R}^m)$ como $f \otimes g := fg$, en donde f y g son representantes de sus respectivas clases de equivalencia.

Capítulo 4

Análisis de Fourier

El análisis de Fourier ha demostrado ser de crucial importancia en muchas áreas de las matemáticas, la física y la ingeniería. En mecánica cuántica, la transformada de Fourier es una herramienta esencial para la solución y la interpretación de la ecuación de Schrödinger, ya que esta ayuda a entender como la función de onda puede describir de manera simultánea las propiedades de localización y la distribución de momento de una partícula.

En este capítulo recopilamos algunos resultados del análisis de Fourier que usaremos más adelante. Las demostraciones formales de estos resultados son largas y necesitan de una teoría más elaborada, por lo cual solo expondremos sus enunciados y sus aplicaciones.

4.1. Series de Fourier de funciones complejas

El análisis de Fourier es el *arte* de escribir funciones de onda (funciones periódicas) arbitrarias, como la superposición de funciones trigonométricas. Como un primer paso en el desarrollo de esta teoría consideramos funciones complejas periódicas y sus respectivas series de Fourier.

Definiciones básicas: Dado un número real $L > 0$, definimos a los números:

$$k_n^{(L)} = n \frac{\pi}{L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (4.1)$$

y a las funciones:

$$u_n^{(L)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \exp(ik_n^{(L)}x) \quad (4.2)$$

para toda x y n . Con la vista puesta en las aplicaciones para la mecánica cuántica, llamaremos a las funciones $u_n^{(L)}(x)$, **ondas planas estacionarias** con número de onda k_n . Observemos que cada $u_n^{(L)}(x)$ es una función trigonométrica compleja,

$$u_n^{(L)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}} (\cos(k_n^{(L)}x) + i \operatorname{sen}(k_n^{(L)}x))$$

así también, hay que observar que cada una de estas funciones es periódica con periodo $2L$. Debido a esta periodicidad es suficiente el restringir todas nuestras consideraciones a un intervalo de longitud $2L$, digamos al intervalo $[-L, L]$.

Claramente toda suma finita (superposición o combinación lineal) de la forma,

$$\psi(x) = \sum_{n=-N}^N c_n u_n^{(L)}(x) \quad (4.3)$$

con $x \in [-L, L]$ y con coeficientes complejos arbitrarios c_n , representa a una función *suave* (continuamente diferenciable) en el intervalo $[-L, L]$, con la propiedad, $\psi(-L) = \psi(L)$. La expresión (4.3) es conocida como **suma trigonométrica** o **suma de Fourier**. Para $n \geq 0$ la suma,

$$c_n u_n^{(L)}(x) + c_{-n} u_{-n}^{(L)}(x) \quad (4.4)$$

se conoce como un **sumando de Fourier** de orden n .

4.2. Series de Fourier de funciones de cuadrado integrable en $[-L, L]$

Decimos que una función compleja ψ , es de cuadrado integrable en el intervalo $[-L, L]$, si y solo si:

$$\int_{-L}^L |\psi(x)|^2 dx < \infty$$

En el capítulo anterior estudiamos de forma muy general al espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$, al cual nos referimos como el espacio de las funciones de cuadrado integrable en todo \mathbb{R}^n ; de manera completamente análoga a como se obtuvo este espacio, se construye al espacio de Hilbert $L^2([-L, L])$, de las funciones de cuadrado integrable en el intervalo $[-L, L]$.

Es un resultado fundamental del análisis de Fourier el que toda función $\psi \in L^2([-L, L])$, puede ser aproximada, en la norma de $L^2([-L, L])$, por ondas planas estacionarias (ec. 4.2), tal y como lo establecemos a continuación:

Series de Fourier de funciones en $L^2([-L, L])$: Sea $\psi \in L^2([-L, L])$. Entonces, en la norma de $L^2([-L, L])$:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\| \psi - \sum_{n=-N}^N c_n u_n^{(L)} \right\| = 0 \quad (4.5)$$

con,

$$c_n = \int_{-L}^L \overline{u_n^{(L)}(x)} \psi(x) dx = (u_n^{(L)}(x), \psi) \quad (4.6)$$

en donde (\cdot, \cdot) denota al producto interno de $L^2([-L, L])$. A la suma trigonométrica infinita,

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n u_n^{(L)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N c_n u_n^{(L)} \quad (4.7)$$

la llamaremos la **serie de Fourier** de la función ψ . Los coeficientes complejos c_n , son cuadrado sumables; mas aun, su suma tiene el valor:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 = \int_{-L}^L |\psi(x)|^2 dx < \infty \quad (4.8)$$

†

La convergencia de la serie de Fourier de una función, en la norma de $L^2([-L, L])$ debe de ser entendida como **convergencia en la media**, esto es convergencia en el sentido de que:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\| \psi - \sum_{n=-N}^N c_n u_n^{(L)} \right\| = \left\| \psi - \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n u_n^{(L)} \right\| = 0$$

como vimos en el capítulo anterior, esta expresión solo implica que $\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n u_n^{(L)}(x)$, en C.T.P. así, la convergencia en la media no implica que la serie de Fourier de una función converja a esta para todo valor fijo de $x \in [-L, L]$ es decir, la serie no necesariamente converge puntualmente. Esta observación es importante si nuestra función ψ tiene discontinuidades de *salto*. Recordemos que una función de cuadrado integrable no necesita ser continua, por ejemplo, la función característica del intervalo $[-1, 1]$, $\chi_{[-1,1]}(x)$ tiene discontinuidades de tipo *salto* en $x = \pm 1$, pero claramente es de cuadrado integrable en todo intervalo $[-L, L]$.

Si tomamos solamente una cantidad finita de sumandos de la serie de Fourier de una función de cuadrado integrable, obtenemos una aproximación de esta a través de una suma de Fourier finita ψ_N . Toda suma de Fourier finita es una función *suave* con la propiedad $\psi_N(-L) = \psi_N(L)$ (ec. (4.2)). Si intentamos aproximar de esta manera a una función con discontinuidades de salto, observaremos que cerca de los puntos de discontinuidad, las sumas de Fourier finitas empiezan a oscilar muy rápidamente, sin que las oscilaciones bajen su amplitud mientras la sumas crecen en términos, haciendo que la serie de Fourier no converja puntualmente en donde la función es discontinua, pero si en el sentido de la ecuación (4.5).

Si $\psi \in L^2([-L, L])$ es una función *suave* (continuamente diferenciable en $[-L, L]$), con la propiedad $\psi(-L) = \psi(L)$, podemos asegurar la convergencia puntual y uniforme de la serie de Fourier a la función, es decir:

$$\max_{-L \leq x \leq L} \left[\sum_{n=-N}^N c_n u_n^{(L)}(x) - \psi(x) \right] \rightarrow 0 \quad (4.9)$$

cuando $N \rightarrow \infty$.

4.3. La transformada de Fourier

Es interesante estudiar el comportamiento de las series de Fourier en el límite cuando la longitud del intervalo de periodicidad de una función tiende a infinito ya que esto nos conduce naturalmente al estudio de funciones no periódicas.

Consideremos una función suave ψ , que se anula fuera del intervalo $[-L_0, L_0]$. Para $L > L_0$, definimos a la función:

$$\hat{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-L}^L e^{-ikx} \psi(x) dx \quad (4.10)$$

Para todo $k \in \mathbb{R}$.

Luego, la serie de Fourier de la función ψ converge puntualmente y esta dada por:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{\psi}(k_n^{(L)}) e^{ik_n^{(L)}x} \frac{\pi}{L} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{\psi}(k_n^{(L)}) e^{ik_n^{(L)}x} (k_{n+1}^{(L)} - k_n^{(L)}) \end{aligned} \quad (4.11)$$

en donde,

$$k_n^{(L)} = \frac{n\pi}{L} \quad ; \quad k_{n+1}^{(L)} - k_n^{(L)} = \frac{\pi}{L} = \Delta^{(L)} k$$

La ecuación (4.11) se puede interpretar como la aproximación de una integral a través de una suma de Riemann:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{\psi}(k_n^{(L)}) e^{ik_n^{(L)}x} \Delta^{(L)} k \approx \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}(x) e^{ikx} dk \quad (4.12)$$

así, en el límite cuando $L \rightarrow \infty$ por las ecuaciones (4.10) y (4.12), obtenemos las expresiones:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}(x) e^{ikx} dk \quad (4.13)$$

$$\hat{\psi}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \quad (4.14)$$

La función $\hat{\psi}$ es conocida como la **transformada de Fourier** de la función ψ . Conoceremos como **transformación de Fourier** al mapeo $\mathcal{F} : \psi \rightarrow \hat{\psi}$, dado por la ecuación (4.14) y como **transformación inversa de Fourier** al mapeo $\mathcal{F}^{-1} : \hat{\psi} \rightarrow \psi$, dado por la ecuación (4.13).

La transformada de Fourier puede ser definida para todas las funciones integrables en el sentido de Lebesgue, ya que la existencia de la integral $\int \psi(x)$, es equivalente a la existencia de la integral $\int |\psi(x)|$ y por tanto también a la existencia de la integral $\int e^{ikx} \psi(x)$.

La transformada de Fourier en n dimensiones

La transformada de Fourier puede ser generalizada fácilmente a funciones de varias variables. Tomemos por ejemplo a una función integrable en \mathbb{R}^2 , $\psi(x_1, x_2)$. Hagamos primero una transformación de Fourier respecto a la variable x_1 y después respecto a la variable x_2 . así obtenemos:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(k_1, k_2) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x_1, x_2) e^{-ik_1x} dx_1 \right] e^{-ik_2x} dx_2 \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \psi(x_1, x_2) e^{-i(k_1x_1+k_2x_2)} dx_1 dx_2\end{aligned}\quad (4.15)$$

La integral de la ecuación anterior esta bien definida y es independiente del orden de integración, siempre y cuando ψ sea una función integrable en \mathbb{R}^2 . Lo anterior sugiere la siguiente generalización de la transformada de Fourier para funciones de varias variables:

Transformada de Fourier para funciones de varias variables: Sea $\psi(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, una función integrable. La transformación de Fourier \mathcal{F} , mapea a la función $\psi(\mathbf{x})$, en la función $\hat{\psi}(\mathbf{k})$, definida por,

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}) = (\mathcal{F}\psi)(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}\quad (4.16)$$

†

El espacio \mathbb{R}^n formado por las variables independientes $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_n) \in \mathbb{R}^n$ es conocido usualmente como el **espacio de Fourier**, o en vista de las aplicaciones que esta teoría tiene en la mecánica cuántica, también se le conoce como el **espacio de momentos**; esto lo distingue del **espacio de posiciones** formado por las variables $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.

En vista de la ecuación (4.13) y siguiendo un procedimiento similar al de las funciones de una variable, definimos a la transformada inversa de Fourier para funciones integrables de varias variables $\hat{\psi}(\mathbf{k})$, como:

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{\psi}(\mathbf{k}) d\mathbf{k}\quad (4.17)$$

Lo anterior es conocido como el **teorema de inversión de Fourier** el cual enunciamos a continuación.

Teorema 4.1. Si ψ es una función integrable en \mathbb{R}^n y si su transformada de Fourier,

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}) = \mathcal{F}\psi(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

es también una función integrable (como función de $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^n$), entonces ψ tiene la representación:

$$\psi(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{\psi}(\mathbf{k}) d\mathbf{k}$$

†

Como hemos observado, una función integrable y su transformada de Fourier dependen una de la otra de una manera simétrica. Aparte del cambio de signo en la expresión de la transformada inversa, debemos de entender que esta no es mas que una transformación de Fourier del espacio de momentos al espacio de posiciones, mas aun tenemos la relación:

$$(\mathcal{F}^{-1}\psi)(\mathbf{x}) = (\mathcal{F}\psi)(-\mathbf{x})\quad (4.18)$$

El siguiente lema describe el rango de la transformación de Fourier.

Lema 4.2. (Riemann-Lebesgue) *La transformada de Fourier $\hat{\psi} = \mathcal{F}\psi$ de una función integrable ψ es una función continua con las siguientes propiedades:*

1. $\hat{\psi}$ es acotada, $\sup_{\mathbf{k} \in \mathbb{R}^n} |\hat{\psi}(\mathbf{k})| \leq \int_{\mathbb{R}^n} |\psi(\mathbf{x})| d\mathbf{x}$.
2. $\hat{\psi}(\mathbf{k}) \rightarrow 0$, cuando $|\mathbf{k}| \rightarrow \infty$.

El mismo resultado es válido para la transformada inversa de una función integrable en el espacio de momentos.

así también, enunciamos el siguiente teorema válido para las funciones en $L^2(\mathbb{R}^n)$ con transformada de Fourier.

Teorema 4.3. (Fourier-Plancherel) *Si ψ es una función integrable y de cuadrado integrable, su transformada de Fourier $\hat{\psi} = \mathcal{F}\psi$, también es de cuadrado integrable, además:*

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} |\hat{\psi}(\mathbf{k})|^2 d\mathbf{k}$$

El teorema anterior establece que la transformación de Fourier \mathcal{F} , es continua respecto a la norma del espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$. Si ψ y ϕ son cercanas entre si respecto a la norma de $L^2(\mathbb{R}^n)$ entonces, $\hat{\psi}$ y $\hat{\phi}$ también son cercanas entre si, ya que $\|\psi - \phi\| = \|\hat{\psi} - \hat{\phi}\|$.

Extensión de la transformada de Fourier a $L^2(\mathbb{R}^n)$

Podemos extender la definición de la transformación de Fourier \mathcal{F} a todas las funciones de cuadrado integrable del espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$. Supongamos que la función ψ es de cuadrado integrable; es un hecho que la función ψ , no es necesariamente integrable (tomemos por ejemplo a la función $|\mathbf{x}|^{-1}$) y por tanto su transformada de Fourier puede no estar definida. Sin embargo, podemos aproximar a ψ a través de funciones integrables de la siguiente forma: Para todo $n \in \mathbb{N}$, definimos a las funciones,

$$\psi_n(\mathbf{x}) = \begin{cases} \psi(\mathbf{x}) & \text{si } |\mathbf{x}| \leq n \\ 0 & \text{si } |\mathbf{x}| > n \end{cases}$$

Entonces, cada ψ_n es integrable y observamos que,

$$\|\psi - \psi_n\|^2 = \int_{|\mathbf{x}| > n} |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \rightarrow 0$$

cuando $n \rightarrow \infty$. así, una función arbitraria de cuadrado integrable es el límite de una sucesión de funciones integrables. Esto demuestra que el conjunto de funciones de $L^2(\mathbb{R}^n)$ que son integrables, es denso en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Al ser $L^2(\mathbb{R}^n)$ un espacio de Hilbert, la sucesión $\{\psi_n\}$ es de Cauchy. Luego por el teorema 4.3 y al estar cada una de las ψ_n en el dominio de \mathcal{F} , la sucesión $\{\mathcal{F}\psi_n\}$ también esta en $L^2(\mathbb{R}^n)$ y es de Cauchy; por lo tanto tiene límite en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Ya que la continuidad de la transformación de Fourier es una propiedad que deseamos conservar, definimos su extensión a $L^2(\mathbb{R}^n)$ de la siguiente forma:

Transformación de Fourier en $L^2(\mathbb{R}^n)$: Sea $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ y sea $\{\psi_n\}$ una sucesión de funciones integrables tal que, $\lim_{n \rightarrow \infty} \psi_n = \psi$. Definimos a la transformación de Fourier de ψ como:

$$\mathcal{F}\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{F}\psi_n \quad (4.19)$$

así, la transformada de Fourier de ψ esta dada por,

$$\hat{\psi} = \lim_{n \rightarrow \infty} \hat{\psi}_n \quad (4.20)$$

†

Debemos observar que la transformación de Fourier mapea a $L^2(\mathbb{R}^n)$ en si mismo. Definimos a la transformación inversa de Fourier en $L^2(\mathbb{R}^n)$ de manera similar.

Transformación inversa de Fourier en $L^2(\mathbb{R}^n)$: Sea $\hat{\psi} \in L^2(\mathbb{R}^n)$ y sea $\{\hat{\psi}_n\}$ una sucesión de funciones integrables tal que, $\lim_{n \rightarrow \infty} \hat{\psi}_n = \hat{\psi}$. Definimos a la transformación inversa de Fourier de $\hat{\psi}$ como:

$$\mathcal{F}^{-1}\hat{\psi} = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{F}^{-1}\hat{\psi}_n \quad (4.21)$$

así, la transformada inversa de Fourier de $\hat{\psi}$ esta dada por,

$$\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \psi_n \quad (4.22)$$

†

Transformada de Fourier de la derivada

Sea ψ una función integrable en \mathbb{R} . Supongamos que ψ es diferenciable y que tiende a cero cuando $|x| \rightarrow \infty$, de tal forma que su derivada $\frac{d}{dx} \psi$, también es integrable. Entonces integrando por partes y usando el hecho de que la función ψ se anula en el infinito, obtenemos la siguiente expresión para la transformada de Fourier de la derivada de ψ ,

$$\left(\mathcal{F} \frac{d\psi}{dx} \right) (k) = \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{d}{dx} e^{-ikx} \right) \psi(x) dx = ik \mathcal{F}(\psi)(k) \quad (4.23)$$

Observamos que la derivada en el espacio de posiciones es transformada en una simple multiplicación por la variable ik en el espacio de Fourier. Es fácil ver que la ecuación anterior se puede generalizar para derivadas de orden superior:

$$\left(\mathcal{F} \frac{d^n \psi}{dx^n} \right) (k) = \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{d^n}{dx^n} e^{-ikx} \right) \psi(x) dx = (ik)^n \mathcal{F}(\psi)(k) \quad (4.24)$$

Si la función $x\psi(x)$ es integrable, entonces:

$$(\mathcal{F} x\psi)(k) = i \frac{d}{dk} (\mathcal{F}\psi)(k) \quad (4.25)$$

Capítulo 5

Partículas libres

Comenzamos nuestra exposición de la teoría cuántica con la derivación de la ecuación de Schrödinger para una para partículas libres. Este es solo el primer paso en el desarrollo de esta teoría ya que en situaciones mas realistas las partículas pueden interactúan con campos de fuerza o con otras partículas y pueden ser detectadas solamente a través de su interacción con algún dispositivo de medición, aunque un buen entendimiento del comportamiento libre es importante para la descripción asintótica de partículas interactuantes en experimentos de dispersión, tal y como veremos en las próximas secciones. Empezamos con una breve discusión del origen de la teoría cuántica.

5.1. Partículas y ondas

Según la física clásica las entidades fundamentales del mundo físico son las partículas y los campos. Las partículas son capaces de moverse en todo el espacio como trozos bien localizados de materia, mientras que los campos se propagan por todo el espacio como ondas. Sin embargo, este modelo tuvo que ser reconsiderado cuando la disponibilidad de nuevas técnicas experimentales permitió investigar fenómenos físicos a escalas muy pequeñas, las cuales están normalmente mas allá del alcance de nuestros sentidos. En el comienzo del desarrollo de la teoría cuántica moderna en la década de 1920 era claro que muchos fenómenos físicos poseían una inherente dualidad onda - partícula. Por ejemplo, la explicación del efecto foto eléctrico parecía indicar que la propagación de la luz, la cual había sido considerada como un fenómeno ondulatorio clásico, también poseía las características de un haz de partículas (fotones). Por otro lado, bajo ciertas circunstancias partículas materiales tales como los electrones mostraban propiedades ondulatorias.

Es conveniente hacer un repaso acerca de las definiciones básicas de los fenómenos ondulatorios.

Ondas y fenómenos ondulatorios En el caso mas simple, un fenómeno ondulatorio es descrito por una onda plana. La onda describe alguna cantidad de varia periódicamente en el espacio y en el tiempo, caracterizada por una longitud de onda λ y un periodo de oscilación T . Definimos al número de onda k y la frecuencia w respectivamente como:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad ; \quad w = \frac{2\pi}{T} \quad (5.1)$$

Una oda plana con número de onda k , es descrita por la función compleja,

$$u(x, t) = \exp(ikx - iwt) \quad (5.2)$$

La frecuencia w puede depender del número de onda $w = w(k)$. A esta relación entre k y w se le conoce como la **relación de dispersión**. La función,

$$\phi(x, t) = kx - wt \quad (5.3)$$

se conoce como la **fase** de la onda plana. Un punto donde la fase tiene un valor fijo se mueve con **velocidad de fase**,

$$v = \frac{\lambda}{T} = \frac{w}{k} \quad (5.4)$$

Para fenómenos ondulatorios en mas de una dimensión definimos al vector de onda \mathbf{k} , el cual tiene magnitud $\|\mathbf{k}\| = 2\pi/\lambda$ y apunta en la dirección de propagación de la onda. En este caso la onda plana es descrita por la función compleja,

$$u(\mathbf{x}, t) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - iwt) \quad (5.5)$$

para un tiempo fijo t , los puntos \mathbf{x} con una fase fija, están caracterizados por, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} = \text{constante}$. Estos puntos forman un plano ortogonal al vector de onda \mathbf{k} . A estos planos se les conoce como los **planos fase** y se mueven con velocidad de fase, $v = w/\|\mathbf{k}\|$ en la dirección de \mathbf{k} .

Con el objetivo de explicar el efecto foto eléctrico (1905) se introdujeron las relaciones,

$$E = \hbar w \quad ; \quad \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (5.6)$$

entre la energía E de los fotones en un haz y la frecuencia w de la onda de luz, así como entre el momento de los fotones \mathbf{p} y el vector de onda \mathbf{k} . En estas relaciones \hbar denota a la **constante de Planck**, la cual tiene el valor:

$$\hbar = 1,0546 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \quad (5.7)$$

La dimensión física energía \times tiempo, es llamada **acción**.

Efecto foto eléctrico: Este fenómeno consiste en la liberación de electrones de un metal en el cual incide luz con cierta longitud de onda. En este fenómeno se observa que la energía de los electrones liberados depende linealmente de la frecuencia de la onda de luz incidente (y no de la intensidad como podría esperarse). En 1905 este efecto fue descrito asumiendo que los electrones eran dispersados por partículas de luz (fotones). Durante este proceso de dispersión, la energía de los fotones es transferida a los electrones. Si la energía de los fotones es lo suficientemente grande, el metal emite electrones con energía cinética $E_k = E - W$, en donde W es el trabajo necesario para liberar un electrón del metal y E es la energía recibida a través del fotón. Debido a la relación lineal observada entre la energía cinética de los electrones liberados y la frecuencia w del haz de luz, se tiene que la energía de un fotón en el haz de luz debe de ser proporcional a la frecuencia, esto es, $E = \hbar w$. Ya que los fotones se mueven a la velocidad de la luz, deben de tener masa en reposo $m = 0$. Para partículas con masa en reposo igual a cero la relación relativista entre energía y momento se convierte en:

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} = cp \quad (5.8)$$

en donde c es la velocidad de la luz. Por tanto los fotones deben de tener momento:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar w}{c} = \hbar k$$

Ondas de Materia: La descripción del efecto foto eléctrico postula que a un fenómeno ondulatorio como la propagación de la luz, se le puede asociar un fenómeno corpuscular, como lo es la propagación de un haz de partículas.

En 1924 **Louis de Broglie** postulo lo contrario, que a un fenómeno corpuscular, como la propagación de un haz de electrones, se le puede asociar un fenómeno ondulatorio.

El asumió que un haz de electrones puede ser descrito por una función de onda compleja de una onda plana:

$$u(x, t) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t) \quad (5.9)$$

en donde el vector \mathbf{k} y la frecuencia ω están determinadas por el momento y la energía de las partículas como en las ecuaciones (5.6). Estas relaciones crean una conexión entre las propiedades de ondas y partículas haciendo que por tanto no tengan una interpretación obvia. Como hemos visto, un fotón posee un momento:

$$p = \hbar k = \frac{2\pi \hbar}{\lambda}$$

de aquí observamos que la longitud de onda del fotón esta dada por:

$$\lambda = \frac{2\pi \hbar}{p}$$

de Broglie propuso que la expresión anterior era completamente general aplicándose tanto a fotones como a partículas. Para estas ultimas p denota el momento relativista $p = \gamma m v$.

En 1927 Davison y Germer verificaron experimentalmente las suposiciones de *de Broglie*, realizando un experimento en el cual un haz de electrones es dispersado por un cristal, generando un patrón de interferencia propio de los fenómenos ondulatorios.

Dispersión de electrones por un cristal (Experimento de Davison y Germer) Si hacemos incidir un haz de luz sobre un cristal los átomos de este dispersaran a las ondas de luz en todas direcciones. Cada átomo se convierte entonces en el origen de una onda dispersada, pero ya que los átomos de un cristal se encuentran ordenados en un arreglo periódico y regular, hay algunas direcciones en las que todas las ondas dispersadas se encuentran en fase y son amplificadas por interferencia constructiva. así, la intensidad de la onda dispersada muestra máximos de intensidad muy marcados en algunas direcciones así como mínimos de intensidad en otras, formando un patrón de interferencia. La condición para tener una máximo de intensidad a un ángulo θ es, $2d \sin \theta = n\lambda$ (condición de Bragg), en donde n es un entero arbitrario, d es la constante cristalina (parámetro de red) y λ es la longitud de onda de la luz incidente. De esta forma el físico alemán Max von Laue fue capaz de mostrar la naturaleza ondulatoria de los rayos x. Si la longitud de onda es conocida, el patrón de interferencia de la onda dispersada puede ser utilizado para estudiar la estructura interna de un cristal. Esencialmente, el mismo fenómeno de interferencia se observa al dispersar un haz de electrones con una lamina delgada de metal. Si la constante cristalina de la lamina es conocida, la condición de Bragg nos permite determinar la longitud de onda asociada al haz de electrones; Davison y Germer compararon esta longitud de onda, obtenida de forma meramente experimental, con la hipótesis de *de Broglie*, es decir, asumieron que la longitud de onda asociada al haz de electrones con energía $E = p^2/2m$, debería de ser, $\lambda = 2\pi\hbar/p$ y encontraron que tenían el mismo orden de magnitud, con lo cual probaron que un haz de partículas también posee propiedades ondulatorias.

La ecuación libre de Schödinger Las ecuaciones (5.6) y (5.9) son un punto de partida muy común para motivar la ecuación libre de Schödinger. Recordemos que la relación no relativista entre

la energía y el momento de una partícula libre de masa m esta dada por,

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (5.10)$$

a través de las ecuaciones (5.6) vemos que esta corresponde a la relación de dispersión:

$$w = \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} \quad (5.11)$$

Con esta relación es fácil ver que la función (5.9) debe de ser una solución de la ecuación diferencial parcial:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.12)$$

En donde,

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \cdots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}$$

con n la dimensión del **espacio de configuración**. Usualmente $n = 1, 2, 3$. La ecuación (5.12) es la ecuación de Schödinger para partículas libres, la cual fue introducida por el físico Austriaco Erwin Schödinger en 1926. Si una función ψ satisface de la ecuación (5.12) representando una situación física factible, nos referiremos a ella como una **función de onda**.

Cambio de escala: Para facilitar la notación en las secciones siguientes y por motivos teóricos, definimos el siguiente cambio de variable para eliminar a las constantes físicas \hbar y m de la ecuación libre de Schödinger,

$$\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}} \sqrt{\frac{\hbar}{m}} \quad (5.13)$$

de esta forma definimos una nueva función $\tilde{\psi}$ que depende de $\tilde{\mathbf{x}}$, mediante:

$$\tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, t) = \psi(\tilde{\mathbf{x}} \sqrt{\hbar/m}, t) \quad (5.14)$$

esta nueva función satisface la ecuación diferencial parcial:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, t) = -\frac{1}{2} \Delta_{\tilde{\mathbf{x}}} \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, t) \quad (5.15)$$

En donde $\Delta_{\tilde{\mathbf{x}}}$ es el laplaciano respecto a las nuevas coordenadas $\tilde{\mathbf{x}}$. Ya que pudimos haber utilizado las nuevas coordenadas desde un principio omitiremos la \sim de ahora en adelante y consideraremos a la ecuación libre de Schödinger como:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{2} \Delta \psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.16)$$

Por las ecuaciones (5.6) es claro que un conjunto de soluciones de la ecuación (5.12) esta dado por las ondas planas:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - \frac{i}{\hbar} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} t\right) \quad \forall \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \quad (5.17)$$

Estas soluciones describen a un haz de partículas con momento \mathbf{p} . Es fácil ver que sustituyendo a \mathbf{x} por $\mathbf{x} \sqrt{\hbar/m}$ en (5.17), obtenemos las ondas planas que son solución de la ecuación (5.16):

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, t) = \exp\left(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i \frac{\mathbf{k}^2}{2} t\right) \quad (5.18)$$

en donde $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\sqrt{\hbar m}$, es el vector de onda que describe al momento de la onda plana en las nuevas coordenadas. El espacio vectorial \mathbb{R}^n de todos los posibles vectores \mathbf{k} es conocido como el **espacio de momentos**.

Comúnmente las ondas planas son usadas para modelar haces de partículas, ya que claramente una onda plana tiene el mismo modulo $|u(x, t)|$ en todo el espacio a todo tiempo, haciendo que una sola partícula bien localizada no pueda ser descrita de esta forma. también debemos de observar que algo tan complicado como un haz de partículas interactuantes tampoco puede ser descrito por una sola onda plana (mas aun, ni siquiera por un número finito de estas). Por tanto, la descripción de haces de partículas en términos de ondas planas solo es aceptable para haces de baja intensidad, en los cuales las partículas están tan separadas unas de otras que se les puede considerar como objetos físicos independientes sin interacción con su alrededor.

5.2. Paquetes de ondas

El comportamiento ondulatorio de las partículas se manifiesta a través de los patrones de interferencia observados experimentalmente, como en el caso del experimento de Davison y Germer. Tal como sucede en el caso de la interferencia óptica, los patrones de interferencia producidos por partículas, pueden ser descritos por la superposición lineal de dos o mas ondas planas. Esto nos lleva a plantear el **principio de superposición**: Si las funciones de onda $\psi_1(\mathbf{x}, t)$ y $\psi_2(\mathbf{x}, t)$ son solución de la ecuación libre de Schrödinger, entonces la suma $\psi_1(\mathbf{x}, t) + \psi_2(\mathbf{x}, t)$ también es una solución, es decir, describe una posible situación física. Esto surge del hecho de que la ecuación libre de Schrödinger,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \Delta \psi(\mathbf{x}, t)$$

es lineal en ψ , es decir, no contiene potencias de ψ o productos de ψ con sus derivadas, solo contiene derivadas simples $\frac{\partial}{\partial t}$ y Δ . Si explotamos aun mas la linealidad de las derivadas de la ecuación libre de Schrödinger encontramos que una combinación lineal de la forma, $\psi = a \psi_1 + b \psi_2$ ($a, b \in \mathbb{C}$) también es una solución de la ecuación.

Esta observación puede ser generalizada fácilmente para la superposición de un número arbitrario de soluciones:

Linealidad de la ecuación de Schrödinger Cualquier combinación lineal finita de soluciones ψ_i de la ecuación libre de Schrödinger,

$$\psi = \sum_{i=1}^n a_i \psi_i \quad (5.19)$$

con $a_i \in \mathbb{C}$, es también una solución de la ecuación.

†

En particular podemos obtener nuevas funciones de onda combinando ondas planas $u_{\mathbf{k}}$ con diferentes momentos. Por ejemplo, cualquier serie de Fourier dependiente del tiempo de la forma:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_i a_i u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, t) \quad (5.20)$$

es una solución de la ecuación libre de Schrödinger. El coeficiente complejo a_i es la amplitud de la onda plana con vector de onda \mathbf{k}_i .

Superposición continua de ondas planas

En muchas ocasiones una superposición finita no es suficiente para representar a una función bien localizada en términos de ondas planas. Para resolver esto usamos una superposición continua (no numerable) de ondas planas con diferente momento \mathbf{k} . Tal superposición continua esta dada por la integral:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^n} \phi(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{k} \quad (5.21)$$

Aquí, cada onda plana esta multiplicada por el factor escalar $\phi(\mathbf{k})$. Como en el caso de una combinación lineal finita, los coeficientes $\phi(\mathbf{k})$ deben de ser números complejos. Por tanto la **función de amplitud** ϕ es una función compleja de la variable real \mathbf{k} .

Ahora surge la siguiente pregunta: Supongamos que tenemos una función arbitraria ψ . ¿Como podemos obtener la función de amplitud ϕ tal que ψ pueda ser escrita como una superposición continua de ondas planas como en la ecuación (5.21)? Mas aun, ¿Como podemos conocer la distribución de momento de ψ ?

Por simplicidad consideraremos primero la situación al tiempo $t = 0$. Una onda plana con momento \mathbf{k} al tiempo $t = 0$ esta dada por la función, $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, 0) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$. La superposición continua de ondas planas que representa a ψ al tiempo $t = 0$, esta dada por la integral:

$$\psi(\mathbf{x}, t) \Big|_{t=0} = \psi_0(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \phi(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (5.22)$$

Por lo visto en el capitulo anterior, sabemos que cualquier función integrable ψ_0 con transformada de Fourier integrable $\hat{\psi}_0$, puede ser escrita como,

$$\psi_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \hat{\psi}_0(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (5.23)$$

en donde,

$$\hat{\psi}_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \psi_0(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (5.24)$$

Comparando las ecuaciones (5.22) y (5.23) podemos observar que la superposición continua de ondas planas puede ser interpretada como la transformada de Fourier inversa de la función ψ . así la función de amplitud ϕ , es solo la transformada de Fourier de la función de onda.

Comúnmente a las funciones de onda que pueden ser expresadas como series de Fourier (5.20) o como transformadas de Fourier inversas (5.23) se les conoce como **paquetes de ondas** por el hecho de que son el resultado de la superposición ondas planas y por razones que veremos mas adelante que tienen que ver con las mediciones físicas que se pueden hacer sobre los sistemas cuánticos.

Distribución de momento de una función de onda: Cualquier función de onda integrable ψ_0 , puede ser vista al tiempo $t = 0$, como una superposición continua de ondas planas $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$, en donde cada onda plana con momento \mathbf{k} tiene una amplitud:

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \hat{\psi}_0(\mathbf{k}) \quad (5.25)$$

con $\hat{\psi}_0$ la transformada de Fourier de ψ . así, la distribución de momento de una función de onda esta dada por su transformada de Fourier.

Evolución de las funciones de onda

Habiendo descrito a la función ψ_0 como la transformada de Fourier inversa de una función $\hat{\psi}_0$, podemos ahora determinar fácilmente la solución general $\psi(\mathbf{x}, t)$ de la ecuación libre de Schrödinger, la cual es igual a ψ_0 cuando $t = 0$. Esto lo podemos hacer ya que sabemos como es la evolución en el tiempo de las ondas planas $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$, cuya superposición forma a la función inicial ψ_0 .

Una onda plana esta dada para todo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ y para todo tiempo t por la función:

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, t) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - ik^2t/2) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \cdot \exp(-ik^2t/2) = \exp(-ik^2t/2) \cdot u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, 0)$$

De aquí observamos que la evolución de la onda plana $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, 0)$ esta dada por el factor $\exp(-ik^2t/2)$. Insertando este factor de evolución en la ecuación (5.22), obtenemos:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - ik^2t/2} \hat{\psi}_0(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (5.26)$$

Podemos verificar de manera formal que la ecuación (5.26) es en efecto una solución de la ecuación libre de Schrödinger, insertándola en esta e intercambiando el orden de integración y derivación. Para hacer esto de forma rigurosa, la función $\hat{\psi}_0$ debe de ser suficientemente bien comportada. La condición matemática para permitir el intercambio de derivada e integral, es que las funciones $\hat{\psi}_0$ y $k^2 \hat{\psi}_0$, sean integrables.

Como podemos observar, la ecuación (5.26) establece que la solución $\psi(\mathbf{x}, t)$ de la ecuación libre de Schrödinger al tiempo t , es la transformada de Fourier inversa de la función,

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}, t) = \exp(-ik^2t/2) \hat{\psi}_0(\mathbf{k}) \quad (5.27)$$

así, hemos resuelto el siguiente problema con valor inicial: Dada una función apropiada ψ_0 , determinar una solución $\psi(\mathbf{x}, t)$ de la ecuación libre de Schrödinger, tal que, $\psi(\mathbf{x}, 0) = \psi_0(\mathbf{x})$.

El procedimiento para resolver este problema se puede resumir de la siguiente manera:

Solución del problema con valor inicial para partículas libres:

1. Determinar la transformada de Fourier $\hat{\psi}_0$ de la función inicial ψ_0 .
2. Determinar la transformada de Fourier inversa de la función $\exp(-ik^2t/2) \hat{\psi}_0(\mathbf{k})$.

†

El procedimiento anterior es valido para toda función inicial ψ_0 que este en el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$, ya que como vimos en el capitulo anterior, la transformada de Fourier esta definida para todas las funciones Lebesgue integrables en \mathbb{R}^n , las cuales forman un conjunto denso en $L^2(\mathbb{R}^n)$. así, podemos definir una función que evolucione en el tiempo $\psi(\mathbf{x}, t)$, incluso si la función inicial ψ_0 , no es diferenciable.

Estudiemos ahora un ejemplo concreto para ilustrar la teoría desarrollada hasta este punto.

Ejemplo: Función Gaussiana

Calculemos la evolución temporal de la función inicial:

$$\psi_0(x) = e^{-\alpha x^2/2} e^{ipx} \quad (5.28)$$

con $x \in \mathbb{R}$, $\alpha > 0$ y $p \in \mathbb{R}$.

Paso 1: La transformada de Fourier de esta función esta dada por:

$$\hat{\psi}_0(k) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \exp\left(-\frac{(k-p)^2}{2\alpha}\right) \quad (5.29)$$

Notemos que el momento k de ψ_0 esta distribuido alrededor del momento promedio p y $\hat{\psi}_0$ es una función real.

Paso 2: La solución al tiempo t del problema con valor inicial esta dada por:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{ikx} e^{-ik^2t/2} e^{-(k-p)^2/2\alpha} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \exp(-p^2/2\alpha) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{it+1/\alpha}{2} q(k)^2 + \frac{(ix+p/\alpha)^2}{2(it+1/\alpha)}\right) dk \end{aligned} \quad (5.30)$$

en donde:

$$q(k) = k - \frac{ix+p/\alpha}{it+1/\alpha} \quad (5.31)$$

de donde obtenemos la siguiente solución:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \exp\left(-\frac{p^2}{2\alpha} + \frac{(ix+p/\alpha)^2}{2(it+1/\alpha)}\right) \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \int_{\mathbb{R}} \exp(-(it+1/\alpha)q(k)^2/2) dk \quad (5.32)$$

La integral de la ecuación anterior tiene la siguiente solución:

$$\int_{\mathbb{R}} \exp(-(it+1/\alpha)q(k)^2/2) dk = \int_{\mathbb{R}} e^{-(it+1/\alpha)k^2/2} dk = \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{it+1/\alpha}} \quad (5.33)$$

por tanto la solución la función de onda para todo \mathbf{x} y t esta dada por:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{1+i\alpha t}} \exp\left(-\frac{\alpha x^2 - 2ixp + ip^2t}{2(1+i\alpha t)}\right) \quad (5.34)$$

Un calculo elemental muestra que la parte real de la función exponencial en la ecuación (5.34) es:

$$-\frac{\alpha}{2(1+\alpha^2 t^2)} (x-pt)^2 \quad (5.35)$$

así, el modulo de la función de onda Gaussiana al tiempo t es de nuevo una función Gaussiana,

$$|\psi(x, t)| = (1+\alpha^2 t^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{\alpha(t)}{2} (x-pt)^2\right) \quad (5.36)$$

en donde,

$$\alpha(t) = \frac{\alpha}{1+\alpha^2 t^2} \quad (5.37)$$

La función Gaussiana $|\psi(x, t)|$ esta centrada alrededor de $x(t) = pt$, que no es mas que la posición al tiempo t de una partícula libre clásica de masa $m = 1$ (recordemos que estamos en un sistema de unidades en el cual $\hbar/m = 1$) con momento p y condición inicial $x(0) = 0$. El ancho de la función Gaussiana esta dado por $1/\sqrt{\alpha(t)}$ y aumenta mientras t crece; llamaremos a esto **propagación del paquete de ondas**. Al mismo tiempo el valor máximo de la función Gaussiana disminuye como $1/\sqrt{t}$.

Conservación de la norma

La propagación del paquete de ondas ψ y la disminución simultanea de su modulo, nos lleva a la conservación de la norma:

$$\|\psi(t)\|^2 = \int_{\mathbb{R}^n} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} \quad (5.38)$$

Invariancia temporal de la norma: Para cualquier solución $\psi(\mathbf{x}, t)$ de cuadrado integrable (respecto a \mathbf{x}) de la ecuación libre de Schrödinger, la norma (5.38) es independiente del tiempo, es decir:

$$\|\psi(t)\|^2 = \|\psi(0)\|^2 \quad (5.39)$$

para todo tiempo t .

Para probar esto, tomemos la función $\hat{\psi}(\mathbf{k}, t)$ en el espacio de momentos, la cual se puede rescribir como:

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}, t) = \exp(-ik^2t/2) \hat{\psi}_0(\mathbf{k})$$

pero ya que el modulo del factor de evolución $\exp(-ik^2t/2)$ es uno y por el teorema de Fourier-Plancherel 4.3, tenemos que:

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} |\hat{\psi}(\mathbf{k}, t)|^2 d\mathbf{k} = \int_{\mathbb{R}^n} |\hat{\psi}_0(\mathbf{k})|^2 d\mathbf{k} = \int_{\mathbb{R}^n} |\psi_0(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

□

5.3. Interpretación física de la función de onda

¿ Que es lo que la función de onda describe? ¿Cual es su significado físico? Hasta ahora nuestra discusión solo a relacionado a la función de onda ψ , con la distribución de la posición en una región y a su transformada de Fourier $\hat{\psi}$, con la contribución de momentos.

Como hemos visto, los paquetes de ondas tienden a propagarse en regiones cada vez mas grandes del espacio conforme evolucionan en el tiempo. Pero no importa que tan grande sea la región del espacio ocupada por la función de onda, nunca se ha observado experimentalmente que la masa o la carga de una sola partícula se disperse sobre dicha región, al contrario, estas propiedades siempre se encuentran en partículas puntuales bien localizadas.

Consideremos el siguiente ejemplo. Supongamos que al tiempo $t = 0$ sabemos que hay una partícula (libre) de masa m en el origen de un sistema de coordenadas, con una función de onda asociada ψ , la cual es un paquete de ondas Gaussiano, como el del ejemplo del capítulo anterior. Supongamos también que hay sensores detectores de partículas en todo el espacio. Al transcurrir el tiempo, como hemos visto anteriormente, el paquete de ondas se va a propagar por todo el espacio, sin embargo, la experiencia nos dice que la partícula asociada a este, solo va a ser detectada en un y solo un detector a la vez, mas aun, la partícula va a llegar a cada uno de los detectores como un *todo*, es decir, con toda su masa y carga inicial. Entonces, la función de onda no esta relacionada con la propagación de las propiedades físicas de la partícula asociada.

Si repetimos un experimento como el anterior muchas veces, vamos a observar que en cada nuevo experimento la partícula es encontrada en diferentes regiones del espacio: con mayor frecuencia en donde la función de onda tiene un modulo mayor y con menor frecuencia en donde tiene un modulo menor. La conexión entre la partícula y su función de onda es meramente estadística, ya que esta

ultima muestra la probabilidad de encontrar a la partícula en cierta región del espacio al realizar un experimento. Lo anterior fue sugerido por Max Born en 1926 y se conoce como la **interpretación estadística de la función de onda**, la cual establecemos a continuación:

Interpretación estadística de la función de onda: Supongamos que una partícula puede ser descrita por la función de onda $\psi(\mathbf{x})$ que satisface la condición de normalización:

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = 1 \quad (5.40)$$

Entonces la expresión:

$$p(B) = \int_B |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} \quad (5.41)$$

se refiere a la probabilidad de encontrar a la partícula en la región B del espacio de configuración \mathbb{R}^n .

Similarmente:

$$\int_G |\hat{\psi}(\mathbf{k}, t)|^2 d\mathbf{k} \quad (5.42)$$

se refiere a la probabilidad de que el momento de la partícula se encuentre en el subconjunto G del espacio de momentos \mathbb{R}^n .

†

Debemos de notar que la interpretación estadística nos da probabilidades sobre *regiones* de \mathbb{R}^n y no sobre puntos individuales. Según esta interpretación no tiene sentido el preguntar:

¿Cual es la probabilidad de encontrar a la partícula asociada a ψ , al tiempo t en el *punto* \mathbf{x}_0 ?

Sin embargo si podemos preguntar:

¿Cual es la probabilidad de encontrar a la partícula asociada a ψ , al tiempo t en una *vecindad* V de \mathbf{x}_0 ?

Para cualquier vecindad V de \mathbf{x}_0 (por pequeña que sea) la respuesta esta dada por la ecuación (5.41). El integrando $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ da la **densidad de probabilidad** en el punto \mathbf{x} al tiempo t . Para $\hat{\psi}$ sucede algo completamente análogo con el momento \mathbf{k} .

La función de onda contiene información acerca de la posición una partícula y a través de la transformada de Fourier, del momento que esta pueda tener al mismo tiempo.

Para aplicar la interpretación estadística a una función de onda de cuadrado integrable, esta necesita ser normalizada primero. El procedimiento de normalización completamente inmediato para funciones $\psi \in L^2(\mathbb{R}^2)$ tales que $\psi(\mathbf{x}) \neq 0$ para C.T.P. ya que solo hay que calcular la norma de la función:

$$\|\psi\| = \left(\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} \right)^{1/2}$$

y remplazar a ψ por $\psi/\|\psi\|$.

La condición de normalización (5.40) nos dice que la probabilidad que tenemos de encontrar a la partícula *en algún lugar* del espacio, es uno (es decir la partícula no desaparece nunca, pero puede estar en el lugar que menos esperamos). Esta probabilidad es independiente del tiempo si la función

de onda depende temporalmente de acuerdo con la ecuación libre de Schrödinger. El teorema de Fourier-Plancherel implica que la misma condición de normalización se cumple para la distribución de momento.

¿Como se mueve una partícula de una región del espacio a otra? Cuánticamente esto es descrito como el cambio en las probabilidades de posición asociadas con estas regiones. El mecanismo detrás de este cambio es el *movimiento* del paquete de ondas de acuerdo con la ecuación de Schrödinger. Sin embargo la interpretación estadística no es capaz de describir como se mueve en realidad una partícula a través del espacio, ya que solo nos da la probabilidad de encontrarla en una región a un cierto tiempo. Hemos encontrado entonces que en la mecánica cuántica no existe una noción de trayectoria, tal como en la física clásica.

5.4. Valores esperados

Supongamos que $\psi(\mathbf{x})$ es una función de onda normalizada. Ya que la función $|\hat{\psi}(\mathbf{k}, t)|^2$ describe la densidad de probabilidad de la posición, podemos calcular el **valor esperado** (o valor promedio) del resultado de muchas mediciones de la posición. Este valor esta dado por:

$$\langle \mathbf{x} \rangle_{\psi} = \int_{\mathbb{R}^n} \mathbf{x} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} \quad (5.43)$$

De forma similar, el valor esperado del momento \mathbf{k} de un estado ψ se obtiene a través de la interpretación de la transformada de Fourier $\hat{\psi}$ como la densidad de probabilidad del momento:

$$\langle \mathbf{k} \rangle_{\hat{\psi}} = \int_{\mathbb{R}^n} \mathbf{k} |\hat{\psi}(\mathbf{k}, t)|^2 d\mathbf{k} \quad (5.44)$$

El resultado de muchas mediciones de la posición y del momento va a estar distribuido alrededor de sus respectivos valores esperados. Como es bien sabido, el ancho de las distribuciones de los valores medidos, son las incertidumbres Δx y Δk , las cuales satisfacen el **principio de incertidumbre de Heisenberg**:

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.45)$$

El principio de incertidumbre de Heisenberg establece que una distribución de la posición muy localizada (es decir una distribución no muy ancha) corresponde a una distribución de momento muy amplia y viceversa. Este principio también implica que no existen estados para los cuales, tanto la posición como el momento, tengan distribuciones bien localizadas simultáneamente.

En principio no hay un limite para la precisión de la posición o del momento que pueda tener una función de onda. Sin embargo, el principio de incertidumbre implica que no puede haber una función de onda cuya distribución de momento solo conste de un valor. El momento de las ondas planas solo tiene un valor, pero estas no pueden ser normalizadas, por lo que no tienen una interpretación probabilística real y por si solas no son admisibles como funciones de onda en la mecánica cuántica. Por tanto, no es posible preparar a una partícula en un estado cuántico cuyo momento tenga un solo valor. Similarmente no hay una función de onda cuya posición tenga un solo valor. Tal función de onda se comportaría como una Delta de Dirac, pero esta función resulta no ser de cuadrado integrable [9] y por tanto no puede ser normalizada.

Capítulo 6

Estados y observables

En este capítulo describiremos la estructura matemática básica de cualquier teoría cuántica. El primer paso en esta formulación matemática es la asociación de un espacio de Hilbert adecuado a un sistema físico, de tal forma que los vectores en este espacio describan todos los posibles estados del sistema. Veremos también que ciertos operadores lineales corresponden a la medición de cantidades físicas.

6.1. Vectores de estado

En la mecánica clásica, el *estado* de una partícula al tiempo t es descrito por su posición $x(t)$ y su momento $p(t)$, es decir, por un punto en el espacio fase. Una partícula cuántica ocupa una cierta región en el espacio fase cuyo tamaño mínimo está dado por el principio de incertidumbre de Heisenberg, lo cual hace imposible definir en que estado (en el sentido clásico) se encuentra la partícula, ya que no se puede saber con exactitud cual es su posición y su momento a un cierto tiempo. Entonces ¿Que es un *estado* para la mecánica cuántica? Para ver esto primero debemos de examinar a que nos referimos por *estado* en un sistema físico.

De forma general, el estado de un sistema físico debe de ser una colección de propiedades que sean capaces de dar una descripción completa del sistema. El conjunto de información que forma una descripción completa depende de en que aspectos del sistema estamos interesados, aunque en cualquier caso, esta información debe de ser completa en el sentido de que se pueda determinar el estado futuro del sistema a partir de la descripción del estado al tiempo inicial. El desarrollo en el tiempo de un sistema en un cierto estado, usualmente está dado a través de una ley dinámica, tal como una ecuación de evolución o de movimiento. En la mecánica clásica esta ley dinámica está dada por las ecuaciones de Hamilton.

En la mecánica cuántica la función de onda contiene toda la información acerca de la posición y la distribución de momento de una partícula. La información provista por la función de onda también es completa, en el sentido de que si sabemos como es la función al tiempo $t = 0$ podemos determinar, por la ecuación de Schrödinger, como va a ser esta a cualquier otro tiempo. Por tanto, el estado cuántico de una partícula puede ser asociado con su función de onda, con la ecuación de Schrödinger como su ecuación de evolución.

Hay cantidades físicas tales como la masa y la carga eléctrica las cuales afectan el comportamiento de la partícula pero usualmente no son consideradas parte del estado del sistema ya que estas cantidades pueden permanecer constantes en una amplia gama de experimentos dinámicos y

se les considera más como características del sistema en sí y no del estado de este. En el formalismo siguiente, estas cantidades aparecen como parámetros cuyo valor numérico se mantiene constante. Puede suceder que la ecuación de evolución tenga que ser modificada para describir el desarrollo temporal de estados en situaciones extremas, por ejemplo, para partículas con velocidades muy cercanas a la de la luz, ya que en este límite la ecuación de Schrödinger se vuelve imprecisa y tiene que ser remplazada por alguna otra ecuación de evolución que sea invariante de forma relativista. La teoría que desarrollaremos a continuación es válida en el límite no relativista, para partículas con una velocidad mucho menor que la de la luz.

La correspondencia entre estados cuánticos y funciones de onda no es uno a uno. Por ejemplo, si multiplicamos a una función de onda por un número real, esta seguiría describiendo el mismo estado cuántico, ya que el número se anularía cuando normalizáramos a la función de onda para poder aplicar la interpretación probabilística. Mas aun, las ecuaciones (5.41) y (5.42) que describen el contenido físico de la función de onda, no son afectadas si multiplicamos a la función por un **factor de fase** es decir, por un número complejo con módulo uno. Por tanto podemos concluir que después de la normalización una función de onda ψ y su múltiplo escalar $c\psi$ (en donde $c \in \mathbb{C}$, $c \neq 0$) solo difieren por un factor de fase, llevándonos a las mismas predicciones físicas, como por ejemplo, acerca de la probabilidad de encontrar a una partícula en algún lugar del espacio de posiciones o momentos. En este sentido ψ y $c\psi$ describen ambas el mismo estado.

En principio, cualquier función no nula de cuadrado integrable, puede ser usada para definir un estado cuántico. Como hemos visto en las secciones anteriores, el conjunto de todas estas funciones forma al espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$, el cual está asociado claramente con una partícula que se mueve en un espacio de configuración de n dimensiones.

Esta es una de las suposiciones básicas del formalismo de la mecánica cuántica, que los estados de todo sistema físico están dados por vectores de un espacio de Hilbert apropiado y que dos vectores describen el mismo estado, si uno es múltiplo escalar del otro. Establecemos estas suposiciones a continuación.

Estados de un sistema físico Los estados de un sistema cuántico pueden ser descritos por vectores de un espacio de Hilbert apropiado. Dos vectores ψ y ϕ describen el mismo estado, si y solo si, $\phi = c\psi$. Por tanto, los estados físicos corresponden a los sub espacios de una dimensión:

$$[\psi] = \{c\psi \mid c \in \mathbb{C}\} \quad \psi \neq 0 \quad (6.1)$$

del espacio de Hilbert elegido. Cualquier elemento no nulo ψ de este sub espacio, puede ser usado para representar al estado $[\psi]$ ya que las predicciones físicas no dependen de la elección de la función.

†

La mejor manera de representar al estado de un sistema, es mediante una función de onda normalizada ψ ($\|\psi\| = 1$) ya que esto permite una aplicación directa de las reglas de interpretación estadística. Como hemos visto, la evolución temporal que da la ecuación de Schrödinger implica la invariancia temporal de la norma, $\|\psi(t)\| = \|\psi_0\|$, lo que muestra que si la función que describe al estado inicial del sistema está normalizada, entonces las funciones que lo describen a tiempos distintos también lo están.

Principio de superposición

Dadas dos funciones de onda de un sistema ψ_1 y ψ_2 , cualquier combinación lineal $\phi = \psi_1 + \psi_2$ define un nuevo posible estado del sistema. Este principio de superposición solo expresa la linealidad del espacio de Hilbert en el cual estemos trabajando. Sin embargo agregamos las siguientes observaciones:

1. Aunque las funciones de onda ψ y $c\psi$ describen el mismo estado, esto no es cierto para las funciones $\psi_1 + \psi_2$ y $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, al menos que $c_1 = c_2$,

$$[\psi_1 + \psi_2] \neq [c_1\psi_1 + c_2\psi_2]$$

2. Para dos funciones de onda ψ_1 y ψ_2 la densidad de probabilidad de la suma $\psi_1 + \psi_2$ es en general diferente de la suma de las densidades individuales,

$$|\psi_1 + \psi_2|^2 \neq |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$$

6.2. Observables y operadores lineales

Los observables son cantidades físicas como la posición, el momento y la energía, las cuales se pueden medir experimentalmente para saber en que estado se encuentra un sistema. En la mecánica cuántica los observables son descritos por operadores lineales en el espacio de Hilbert del sistema físico en el que estamos interesados. En esta parte especificaremos como extraer información experimentalmente verificable de estos operadores lineales. Comenzaremos estudiando algunos ejemplos concretos de observables, como la posición y el momento.

El operador de posición

Una cantidad que esta relacionada con la posición y que (al menos en principio) puede ser determinada experimentalmente es el valor esperado de la posición. Para una partícula en un espacio de una dimensión esta cantidad puede ser escrita como:

$$\langle x \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx = (\psi, x\psi) \quad (6.2)$$

en donde (\cdot, \cdot) denota al producto interno del espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$. Aquí y en lo siguiente, supondremos que la función ψ esta normalizada ($\|\psi\| = 1$). Desde el punto de vista matemático, la expresión del valor esperado de la posición no es mas que el producto escalar entre ψ y la función ξ , dada por:

$$\xi(x) = x\psi(x) \quad (6.3)$$

El mapeo entre ψ y ξ es un operador lineal del espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$. Claramente, solo necesitamos a este operador para obtener toda la información necesaria acerca de la posición de una partícula en un cierto estado cuántico, por tanto escogemos a este operador lineal como el representante del observable de la posición en el formalismo de la mecánica cuántica.

Operador de posición: El observable de la posición para una partícula en una dimensión, es representado por el **operador de posición** x , el cual se define como el operador lineal que multiplica a la función de onda ψ por la variable x .

†

Seguiremos la usual pero peligrosa convención de denotar tanto al operador como a la variable de posición por la letra x .

Dominio de definición: La definición de un operador lineal no puede estar completa sin que especifiquemos su dominio. El dominio de definición del operador de multiplicación x , es el sub espacio lineal de todas las funciones $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ para las cuales:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx < \infty \quad (6.4)$$

El operador x solo puede ser aplicado a las funciones de este sub espacio, ya que de otra manera la función $x\psi$, no estaría en el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$ haciendo que la expresión (6.2) no tuviera sentido.

¿Como es una función de onda que no esta en el dominio del operador de posición x ? Si la función $x\psi(x)$ no es de cuadrado integrable, podemos decir que ψ tiene a cero muy *despacio* cuando $|x| \rightarrow \infty$. Puede suceder también que la posición no tenga un valor de expectación finito, por ejemplo cuando la función $\sqrt{x}\psi(x)$, no es de cuadrado integrable. Sin embargo, mientras ψ pertenezca al espacio de Hilbert de las funciones de cuadrado integrable, podemos mantener la interpretación de $|\psi(x)|^2$ como la densidad de probabilidad de la posición.

Operador de posición en n dimensiones: Para partículas en un espacio de configuración de n dimensiones, los observables de la posición son representados por una n -tupla de operadores lineales representados por el vector:

$$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \quad (6.5)$$

así cuando hablamos por ejemplo del operador de posición para una partícula en \mathbb{R}^3 , nos estamos refiriendo en realidad al vector formado por los tres operadores de multiplicación por x_1, x_2 y x_3 .

El operador de momento

Para una partícula en una dimensión, el valor esperado del momento esta dado por:

$$\langle k \rangle_{\psi} = \int_{-\infty}^{\infty} k |\hat{\psi}(k)|^2 dk \quad (6.6)$$

De nuevo, es posible representar a esta cantidad como un producto escalar de $L^2(\mathbb{R})$:

$$\langle k \rangle_{\psi} = (\hat{\psi}, k\hat{\psi}) \quad (6.7)$$

con el operador lineal k . Recordamos la siguiente propiedad de la transformada de Fourier \mathcal{F} :

$$\mathcal{F}(-i\psi') = k \mathcal{F}(\psi) = k\hat{\psi}$$

en donde $\psi' = \frac{d}{dx}\psi$. Usando esta propiedad y el teorema de Fourier-Plancherel, obtenemos la siguiente expresión para el valor esperado del momento:

$$\langle k \rangle_{\psi} = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x)} (-i)\psi'(x) dx = (\psi, -i\psi') \quad (6.8)$$

Entonces tiene sentido definir al **operador de momento**, el espacio de configuración \mathbf{x} , como el operador lineal p dado por:

$$p\psi = -i \frac{d}{dx}\psi \quad (6.9)$$

Mientras que en el espacio de momentos, este operador actúa como una multiplicación por la variable k .

$$p\hat{\psi} = k\hat{\psi} \quad (6.10)$$

El dominio del operador de momento es el conjunto de las funciones de cuadrado integrable ψ , para las cuales $k\hat{\psi}$ también es de cuadrado integrable.

Para partículas en un espacio de configuración de n dimensiones, formamos al vector \mathbf{p} con las componentes del momento en las direcciones coordenadas y escribimos al operador de momento como:

$$\mathbf{p} = -i(\partial_1, \dots, \partial_n) \quad (6.11)$$

en donde, $\partial_k = \frac{\partial}{\partial k}$.

Energía cinética

El operador de Laplace $-\Delta$ que aparece en la ecuación de Schrödinger se puede escribir como:

$$-\Delta = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = -\sum_{i=1}^n \partial_i^2 \quad (6.12)$$

Ya que,

$$\frac{1}{2} \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = \frac{|\mathbf{k}|^2}{2}$$

es la expresión clásica para la energía cinética en términos del momento de una partícula (de masa $m = 1$), asociamos al operador lineal:

$$H_0 = -\frac{1}{2} \Delta \quad (6.13)$$

con el observable físico de la energía cinética.

El dominio de H_0 : El operador H_0 tiene que estar definido en el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$. Podríamos definir al dominio de H_0 como el conjunto de funciones doblemente diferenciables, para las cuales $\Delta\psi$ es de cuadrado integrable. Sin embargo, es más apropiado entender a la diferenciabilidad en el sentido de la transformada de Fourier (ec. (4.23)). Diremos que una función ψ está en el dominio de H_0 , $D(H_0)$, si y solo si, la función $k^2 \hat{\psi}(\mathbf{k})$ es de cuadrado integrable.

Para $\psi \in D(H_0)$, la acción de H_0 está dada por:

$$H_0\psi = \mathcal{F}^{-1} \frac{k^2}{2} \mathcal{F}\psi \quad (6.14)$$

6.3. Valor esperado de un observable

Como lo hemos mencionado anteriormente, en la mecánica cuántica, cualquier observable de un sistema físico es representado por un operador apropiado en el espacio de Hilbert del sistema. El valor esperado de cualquier observable se define en completa analogía a los valores esperados de la posición y el momento, tal como lo establecemos a continuación.

Valor esperado: Para cualquier operador lineal A , que representa a un observable físico, el **valor esperado** de A en el estado normalizado ψ , está dado por:

$$\langle A \rangle_\psi = (\psi, A\psi) \quad (6.15)$$

En donde (\cdot, \cdot) es el producto interno del espacio de Hilbert del sistema. Esta cantidad es interpretada como el valor promedio de muchas mediciones realizadas sobre copias idénticas de un sistema físico.

†

Debemos hacer notar que solo los operadores para los cuales $\langle A \rangle_\psi$ sea un número real, pueden representar a un observable, ya que las mediciones físicas son siempre como resultado un número real. Tales operadores son llamados **operadores simétricos** los cuales definimos a continuación.

Definición 6.1. *Un operador con dominio denso es llamado **simétrico** o **Hermitiano**, si todos sus valores esperados son números reales:*

A es simétrico, si y solo si, $(\psi, A\psi) \in \mathbb{R}$, para todo $\psi \in D(A)$.

Hay mas restricciones sobre los operadores que pueden ser asociados con un observable físico. Para que un operador sea un buen candidato para representar a un observable, este debe de ser **auto adjunto**. Como veremos en las próximas secciones, los operadores auto adjuntos son un subconjunto de los operadores simétricos. Ahora daremos la noción que existe en la mecánica cuántica de la incertidumbre en la medición de un observable físico.

Incertidumbre Para un observable A , la cantidad:

$$\Delta_\psi A = \|(A - \langle A \rangle_\psi)\psi\| = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle_\psi)^2 \rangle_\psi} \quad (6.16)$$

es llamada la **incertidumbre** de A en el estado normalizado ψ . La incertidumbre describe la dispersión de los valores realmente medidos del observable A alrededor del valor medio $\langle A \rangle_\psi$.

†

Debemos hacer notar que en general, el valor esperado y la incertidumbre de un observable A , no están definidos para todo ψ del espacio de Hilbert del sistema estudiado. Estas cantidades solo están definidas para las funciones de onda ψ que se encuentren dentro del dominio del operador A .

6.4. Otros observables y la regla de substitución

Hasta ahora, solo hemos introducido a los operadores lineales para los observables de posición, momento y energía cinética. Sin embargo, deseáramos encontrar a los operadores que corresponden a otros observables físicos de interés como el momento angular, la energía potencial etc. En muchos casos, el siguiente procedimiento ha demostrado tener éxito en encontrar a los operadores lineales apropiados para muchos observables de interés.

Clásicamente un observable es una función de la posición y del momento, es decir, una función del espacio fase. Frecuentemente (pero no siempre) es posible obtener un operador cuántico apropiado para un observable, simplemente haciendo la substitución en la expresión clásica de cada componente del momento p , por su correspondiente operador diferencial:

$$p_k \longrightarrow -i \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad k = 1, \dots, n \quad (6.17)$$

y cada componente de \mathbf{x} por su correspondiente operador de multiplicación:

$$x_k \longrightarrow \text{multiplicación por } x_k, \quad k = 1, \dots, n \quad (6.18)$$

en donde n es la dimensión del espacio de configuración. A este procedimiento se le conoce como la **regla de substitución**.

Utilizando unidades en las que \hbar no es igual a 1, la regla de substitución para el momento esta dada por:

$$p_k \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \quad \text{o} \quad \mathbf{p} \longrightarrow -i\hbar \nabla \quad (6.19)$$

Funciones de \mathbf{x}

Si $V(\mathbf{x})$ es una función real de la posición \mathbf{x} , entonces su observable cuántico correspondiente es el operador de multiplicación por $V(\mathbf{x})$:

$$V : \psi(\mathbf{x}) \longrightarrow V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \quad (6.20)$$

Comúnmente el operador V representa a la energía potencial de una partícula. Recordando la definición del Hamiltoniano de un sistema clásico $H = K + V$, introducimos al **operador cuántico Hamiltoniano**:

$$H = -\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{x}) \quad (6.21)$$

Mas adelante veremos la importancia que tiene este operador en el desarrollo de la teoría cuántica. Notemos que el hamiltoniano de una partícula libre esta dado por la ecuación (6.13) (H_0).

El dominio de V : Si $V(\mathbf{x})$ es una función no acotada (por ejemplo $V(\mathbf{x}) = |\mathbf{x}|^2$), el dominio del operador de multiplicación V , consiste solo de las funciones de cuadrado integrable para las cuales:

$$\int_{\mathbb{R}^n} |V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} < \infty \quad (6.22)$$

Si $V(\mathbf{x})$ es una función acotada (es decir, existe una constante M tal que $V(\mathbf{x}) < M, \forall \mathbf{x}$), entonces el operador V esta definido para toda función ψ de cuadrado integrable, ya que en este caso:

$$\int_{\mathbb{R}^n} |V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \leq M^2 \|\psi\|^2 < \infty \quad (6.23)$$

$\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$. así también, el valor esperado de un operador como el anterior siempre es un número real.

Funciones de \mathbf{p}

Si aplicamos directamente la regla de substitución $\mathbf{p} \rightarrow -i\nabla$, a una función $f(\mathbf{p})$, tenemos que darle entonces un significado a la expresión $f(-i\nabla)$. Recordando como actúa el operador de momento en el espacio de momentos (como una multiplicación por la variable k , $k\hat{\psi}$), una función del operador de momento puede ser definida a través de la transformada de Fourier:

$$f(-i\nabla)\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} f(\mathbf{k}) \hat{\psi}(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (6.24)$$

Momento angular

Para una partícula clásica en tres dimensiones, el momento angular en la dirección del eje z es una función del momento y de las coordenadas:

$$L_3 = x_1 p_2 - x_2 p_1 \quad (6.25)$$

Las otras componentes del momento están definidas de manera similar:

$$L_1 = x_2 p_3 - x_3 p_2 \quad L_2 = x_3 p_1 - x_1 p_3 \quad (6.26)$$

Esto es escrito en su forma vectorial como:

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} \quad (6.27)$$

Aplicamos ahora la regla de substitución para el momento angular. De esta forma obtenemos al **operador de momento angular** $\mathbf{L} = (\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \mathbf{L}_3)$ para una partícula en tres dimensiones:

$$L_j = -i \left(x_k \frac{\partial}{\partial x_l} - x_l \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \quad (6.28)$$

en donde (j, k, l) es una permutación cíclica de $(1, 2, 3)$.

Capítulo 7

Funciones propias y valores propios

Las siguientes definiciones pueden resultar familiares a algunas provenientes del algebra lineal, aunque existen algunas diferencias. En un espacio vectorial de dimensión finita, los operadores lineales usualmente están definidos en todo el espacio. En los espacios de funciones, la acción de los operadores lineales no puede ser siempre definida para todos los elementos del espacio y se tiene que restringir el dominio de estos a un sub espacio adecuado, siempre y cuando esto sea posible.

Definición 7.1. Sea A un operador lineal definido en un dominio $D(A)$, el cual es un sub espacio lineal de un espacio vectorial H . Un vector $\phi \in D(A)$, $\phi \neq 0$, es llamado un **vector propio**, si existe un número (posiblemente complejo) λ , tal que:

$$A\phi = \lambda\phi \quad (7.1)$$

Tal número λ , es conocido como **valor propio** del operador A . Si el espacio vectorial en cuestión es un espacio de funciones, a los vectores propios también los conoceremos como **funciones propias** del operador A .

Si a un valor propio λ le corresponde mas de un vector propio, diremos que λ es un **valor propio degenerado**. Es fácil ver que el conjunto de vectores propios correspondientes a un valor propio degenerado, forman un sub espacio vectorial al cual llamaremos **sub espacio propio** asociado al valor λ .

Supongamos que el operador lineal A representa un observable de un sistema físico. Si el estado de dicho sistema esta dado por una función propia ϕ del operador A con valor propio $\lambda \in \mathbb{R}$, entonces el valor esperado de A es igual a λ y su incertidumbre es cero. El reciproco de esta proposición también es cierto y su demostración es inmediata a través de las definiciones de valor esperado e incertidumbre.

$$\langle A \rangle_\phi = \lambda, \quad \Delta_\phi A = 0 \Leftrightarrow A\phi = \lambda\phi; \quad (\lambda \in \mathbb{R})$$

De acuerdo con la interpretación estadística de la función de onda, esto significa que siempre que el estado de un sistema este dado por una función propia de A , una medición de este observable siempre va a dar como resultado al valor λ .

Cuando el estado de un sistema este dado por una función propia de un observable A , diremos que el sistema se encuentra en un **estado propio** de A . Lo anterior lo resumimos a continuación.

Valor de un observable en un estado propio: Si el estado ϕ de un sistema físico es descrito por una función propia de un observable A con valor propio λ , cualquier medición de A dará como resultado al valor λ .

†

Por ejemplo, si ψ es una función propia del Hamiltoniano, $H\psi = E\psi$ con $E \in \mathbb{R}$, cualquier medición de la energía de sistema dará como resultado el valor E .

Hay operadores lineales para los cuales no existe ninguna función propia, la cual sea parte del espacio de Hilbert del sistema. Tal es el caso de los operadores de posición y de momento (y por tanto, del operador de energía cinética, en el caso de las partículas libres). Una función propia de la posición tendría incertidumbre cero, lo cual no es posible en el espacio de Hilbert de las funciones de onda de cuadrado integrable. La función $\delta(x)$ (delta de Dirac) es una especie de función propia generalizada para el operador x , pero $\delta(x)$ no está en el dominio del operador x , ya que esta ni siquiera pertenece al espacio de Hilbert del sistema. De forma similar, las ondas planas $u_k(x) = \exp(ikx)$, satisfacen formalmente la ecuación de valores propios $pu_k(x) = k u_k(x)$, con el operador de momento $p = -i \frac{d}{dx}$. Pero como hemos observado anteriormente, las ondas planas no son funciones de cuadrado integrable y tampoco pertenecen al espacio de Hilbert del sistema.

Es posible que diferentes vectores propios pertenezcan al mismo valor propio.

Definición 7.2. *El sub espacio lineal generado por todas las funciones propias que pertenecen al mismo valor propio λ , es conocido como el **espacio propio** de λ . La dimensión del espacio propio es conocida como la **multiplicidad** o **grado de degeneración** de tal valor propio. Un valor propio es llamado **degenerado** si su multiplicidad es mayor de uno, de otra forma es llamado **no degenerado**.*

7.1. Dependencia temporal de las funciones propias del Hamiltoniano

En la mecánica cuántica las funciones propias del Hamiltoniano son de particular importancia. Si H es el Hamiltoniano de un sistema cuántico, entonces la ecuación de valores propios $H\phi = E\phi$ ($E \in \mathbb{R}$), es conocida como la **ecuación de Schrödinger estacionaria**. Si conocemos una solución de esta ecuación (es decir, una función propia de H), podemos fácilmente obtener una solución de la **ecuación general de Schrödinger dependiente del tiempo**. Esta ecuación dependiente del tiempo no es más que un problema de valor inicial de la forma:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H\psi(t), \quad \psi(0) = \phi \quad (7.2)$$

Si $H\phi = E\phi$, es fácil ver por el método de separación de variables con constante de separación E , que:

$$\psi(t) = e^{-iEt} \phi \quad (7.3)$$

es una solución de la ecuación (7.2). Es claro que si $\psi(0) = \phi$ es una función propia de H , entonces $\psi(t)$ es también una función propia de H , con el mismo valor propio para todo tiempo t .

La dependencia temporal de una función propia es bastante simple como podemos observar, ya que esta completamente descrita por el factor de fase $\exp(-iEt)$. Una función de onda al tiempo t_1 difiere solamente en un factor de fase de otra función de onda al tiempo t_2 . Entonces, de acuerdo con nuestra interpretación cuántica en términos estadísticos, estas funciones de onda representan al mismo estado físico. así, cuando un sistema se encuentra en un estado propio del Hamiltoniano, este permanecerá en este mismo estado por siempre. Por tanto, las funciones propias del Hamiltoniano son también llamadas **estados estacionarios** del sistema físico. Resumimos estos hechos a continuación.

Estados estacionarios: Si el estado de un sistema cuántico está descrito inicialmente por una función propia del Hamiltoniano H , entonces el sistema permanecerá en este estado para siempre. †

Todas las cantidades físicas medibles que pueden ser calculadas a través del estado estacionario del sistema, no dependen del tiempo. Por ejemplo, las distribuciones de posición y momento permanecen iguales para todo tiempo:

$$|\psi(x, t)|^2 = |\phi(x)|^2 \quad , \quad |\hat{\psi}(k, t)|^2 = |\hat{\phi}(k)|^2 \quad (7.4)$$

Un estado propio de H se coloca en una cierta región del espacio fase y se queda en esta para siempre. Este comportamiento es muy diferente al de la propagación de paquetes de ondas libres. A los estados propios del Hamiltoniano y a sus combinaciones lineales las conoceremos como **estados ligados**.

Expansión en términos de funciones propias

Debido a la linealidad de la ecuación general de Schrödinger dependiente del tiempo (7.2) es fácil obtener la solución para cualquier estado inicial que sea una combinación lineal de funciones propias.

Solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo: Sea $\{\psi_n\}$ un conjunto de funciones propias correspondientes a los valores propios $\{E_n\}$ del Hamiltoniano H de un sistema físico. Sea ϕ un estado inicial del sistema que puede ser escrito como una combinación lineal de las funciones ψ_n :

$$\phi = \sum_n c_n \psi_n \quad (7.5)$$

con las constantes complejas apropiadas c_n . Entonces la única solución al problema con valor inicial:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H \psi(t), \quad \psi(0) = \phi \quad (7.6)$$

está dada por:

$$\psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t} \quad (7.7)$$

Capítulo 8

Operadores lineales en espacios de Hilbert

En este capítulo nos dedicaremos a profundizar un poco más en las propiedades matemáticas de la teoría cuántica. Estudiaremos la evolución temporal de las soluciones estrictas de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, daremos otra definición de los operadores simétricos para poder introducir a los operadores auto adjuntos y dar finalmente las características que debe tener un operador lineal para poder representar a un observable físico.

8.1. El Hamiltoniano y la evolución temporal

En el capítulo anterior estudiamos la solución al problema de valor inicial de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en términos de las funciones propias del Hamiltoniano y la expansión de funciones en términos de estas mismas. Sin embargo, surge la siguiente pregunta ¿Que tan grande es el conjunto de funciones de cuadrado integrable que pueden ser representadas en términos de las funciones propias del Hamiltoniano? Para resolver esto, primero es conveniente examinar las propiedades que una función debe de poseer para poder ser una solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

La ecuación de Schrödinger tiene la forma general,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H\psi(t) \quad (8.1)$$

en donde H representa al Hamiltoniano de un sistema físico, el cual es un operador lineal en un espacio de Hilbert \mathcal{H} .

Si H fuera solamente un número, entonces una solución estricta de la ecuación de Schrödinger sería una función $t \rightarrow \psi(t)$ con valores complejos, mas aun, dado un valor inicial ψ_0 , se puede obtener una solución explicita de la forma $\psi(t) = \exp(-iHt)\psi_0$. Pero en nuestro caso H es un operador lineal en el espacio de Hilbert \mathcal{H} y por tanto una solución de la ecuación de Schrödinger debe de ser una función $t \rightarrow \psi(t)$ con valores en \mathcal{H} ; es decir, para cada t , tenemos $\psi(t) \in \mathcal{H}$.

Soluciones estrictas de la ecuación de Schrödinger: ¿Que propiedades debe de tener una solución de la ecuación de Schrödinger? Con el objetivo de darle sentido a la derivada temporal de la ecuación (8.1) tenemos que suponer que el limite,

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\psi(t+h) - \psi(t)}{h} \quad (8.2)$$

existe para toda t y en donde el limite se toma con respecto a la topología del espacio de Hilbert del sistema físico (es decir, respecto a la norma $\|\cdot\|$ de \mathcal{H}). Si este limite existe es denotado como $\frac{\partial}{\partial t} \psi(t)$. Debemos hacer notar que $\frac{\partial}{\partial t}$ no es un operador que actúa sobre el espacio de Hilbert \mathcal{H} del sistema, si no que mas bien este operador actúa sobre las funciones de la forma $t \rightarrow \psi(t)$, las cuales tienen valores en \mathcal{H} ($\psi(t) \in \mathcal{H}$).

Por otro lado, si queremos aplicar el operador H a la función $\psi(t)$, tal como sucede en el lado derecho de la ecuación (8.1), tenemos que estar seguros que la solución al tiempo t se encuentra en el dominio de definición de H . Por tanto, una solución de la ecuación de Schrödinger debe de tener la propiedad,

$$\psi(t) \in D(H), \quad \forall t \quad (8.3)$$

Aquí hemos descrito las propiedades que debe de tener una solución estricta de la ecuación de Schrödinger, es decir, soluciones en sentido literal no importando que estas sean o no parte de un problema con valor inicial, simplemente hemos destacado las propiedades que debe de tener una función para que esta pueda satisfacer la ecuación (8.1) sin ninguna ambigüedad. Antes de que consideremos las soluciones de problemas con valor inicial, mas generales a los vistos en el capítulo anterior, demos de nuevo un vistazo a la evolución temporal de las soluciones de la ecuación libre de Schrödinger.

Evolución temporal de las soluciones libres: La ecuación (5.26) nos muestra que la solución de la ecuación libre de Schrödinger con función inicial ψ_0 puede ser expresada como:

$$\psi(\cdot, t) = \mathcal{F}^{-1} \exp\left(-i \frac{k^2}{2} t\right) \mathcal{F} \psi_0 \quad (8.4)$$

Por tanto, la evolución temporal puede ser descrita por medio de la acción de un operador lineal sobre la función inicial ψ_0 . Este operador es la función exponencial del Hamiltoniano libre $H_0 = p^2/2$, esto es:

$$e^{-iH_0 t} = \mathcal{F}^{-1} \exp\left(-i \frac{k^2}{2} t\right) \mathcal{F} \quad (8.5)$$

Por tanto, la evolución temporal de las soluciones libres, es la transformada de Fourier inversa de un operador de multiplicación acotado en el espacio de momentos. Debemos hacer notar que no es del todo obvio el como definir al operador $\exp(-iH_0 t)$ en términos de la conocida serie de potencias de la función exponencial compleja, ya que esta resulta ser una suma infinita de operadores lineales no acotados ($\frac{d}{dx}$ resulta ser un operador lineal no acotado [19]). Mas aun, para todo entero positivo n , el dominio del operador H_0^{n+1} resulta ser estrictamente menor al del operador H_0^n . El operador de evolución de las soluciones libres posee las siguientes propiedades:

Propiedades del operador $\exp(-iH_0 t)$:

1. El dominio del operador $\exp(-iH_0 t)$ consiste de todo el espacio de Hilbert \mathcal{H} .
2. $\|\exp(-iH_0 t)\psi\| = \|\psi\|$, para toda $\psi \in \mathcal{H}$.
3. Si $\psi \in D(\mathcal{H}_0)$, entonces $\psi(t) = \exp(-iH_0 t)\psi_0$ es una solución estricta de la ecuación libre de Schrödinger.

La primera propiedad establece que podemos definir una evolución temporal para cualquier estado inicial del espacio de Hilbert del sistema. La segunda propiedad establece que el operador de evolución es acotado (por tanto continuo) y de norma uno, para todo t . Por lo tanto, la norma de $\psi(t)$ es independiente de t , lo cual es esencial para nuestra interpretación estadística de la función de onda. Esta propiedad también implica que la solución depende de la condición inicial de forma continua, ya que si comparamos dos evoluciones temporales $\psi(t)$ y $\phi(t)$, correspondientes a dos estados iniciales diferentes ψ_0 y ϕ_0 , entonces:

$$\|\psi(t) - \phi(t)\| = \|\exp(-iH_0t)(\psi_0 - \phi_0)\| = \|\psi_0 - \phi_0\|$$

Si los estados iniciales están muy juntos (en el sentido de la norma $\|\cdot\|$) entonces, los estados al tiempo t también van a estar muy juntos. así, la separación de los estados es constante en el tiempo.

La tercera propiedad establece que el dominio de H_0 es invariante en el tiempo, es decir, si el estado inicial pertenece a $D(H_0)$, entonces el estado al tiempo t también es parte de este dominio. Mas aun, el mapeo $t \rightarrow \psi(t)$, es diferenciable con respecto a t en el sentido de la ecuación (8.2).

Existen funciones de onda ψ en $L^2(\mathbb{R}^n)$ las cuales no pertenecen al dominio de H_0 (a saber, cualquier función discontinua). Sin embargo, el operador $\exp(-iH_0t)$ es capaz de definir una evolución temporal para este tipo de estados iniciales, aunque estrictamente hablando estos estados no representen una solución estricta de la ecuación libre de Schrödinger.

8.2. Operadores unitarios

En el capítulo de espacios de Hilbert, en la definición 2.11 introdujimos a los operadores unitarios. Es claro que un espacio de Hilbert \mathcal{H} es isomorfo a si mismo y por tanto existe un operador unitario tal que, $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, con la propiedad de que:

$$(U\psi, U\phi) = (\psi, \phi) \quad \forall \psi, \phi \in \mathcal{H} \quad (8.6)$$

en particular tenemos que:

$$\|U\psi\| = \|\psi\| \quad \forall \psi \in \mathcal{H} \quad (8.7)$$

debido a esta ultima propiedad diremos que el operador unitario U , es también un operador **isométrico**. En el desarrollo siguiente supondremos que los operadores unitarios mapean a \mathcal{H} en si mismo.

Un ejemplo de un operador unitario del espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$, es la transformada de Fourier \mathcal{F} . Este hecho es consecuencia inmediata de teorema de Fourier-Plancherel (4.3) y del hecho de que \mathcal{F} y la transformada inversa \mathcal{F}^{-1} están definidas en todo el espacio $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Otro ejemplo de operador unitario es $\exp(-iH_0t)$, tal como se definió en la ecuación (8.5). Que este operador sea unitario surge del hecho de que la transformada de Fourier es un operador unitario y que la multiplicación por el factor de fase, $\exp(-ik^2t/2)$ defina también a un operador unitario en el espacio de momentos.

Debemos hacer notar que todo operador unitario U , satisface las dos primeras propiedades que cumple el operador de evolución para el caso libre $\exp(-iH_0t)$. Por esta razón nos enfocaremos en describir la evolución temporal de los sistemas cuánticos en términos de operadores unitarios.

8.3. Evolución temporal y grupos unitarios

El estudio de la evolución temporal de los sistemas cuánticos nos lleva a la definición del operador lineal de evolución $U(t)$, el cual mapea al estado inicial del sistema ψ_0 , al estado del sistema al tiempo t , $\psi(t)$. Una propiedad que debe de tener este operador de evolución es la de mantener la norma de los estados a todo tiempo, es decir, $\|\psi_0\| = \|\psi(t)\| = \|U(t)\psi_0\|$, así como la de mapear al espacio de Hilbert del sistema en si mismo, tal como lo hacen los operadores unitarios. Por tanto podemos decir que para cada t , el operador $U(t)$ es unitario en el espacio de Hilbert del sistema. Esto nos lleva a introducir a los **grupos unitarios**.

Definición 8.1. *Un grupo unitario de un parámetro, es una función $t \rightarrow U(t)$, de los números reales $t \in \mathbb{R}$ al conjunto de los operadores lineales de un espacio de Hilbert \mathcal{H} , con las siguientes propiedades:*

1. Para toda t , $U(t)$ es un operador unitario. (propiedad unitaria)
2. $U(0) = \mathbf{1}$, $U(t)U(s) = U(t+s)$, para toda s, t . (propiedad de grupo)
3. $\lim_{t \rightarrow 0} U(t)\psi = \psi$, para toda $\psi \in \mathcal{H}$. (continuidad fuerte)

en donde $\mathbf{1}$ denota al **operador identidad**.

Un grupo unitario posee un **generador** el cual aparece en la ecuación de evolución (ecuación de Schrödinger) del sistema cuántico que se esta estudiando.

Definición 8.2. *Sea $U(t)$ un grupo unitario de un parámetro en un espacio de Hilbert \mathcal{H} . El generador infinitesimal H del grupo unitario, es el operador lineal dado por:*

$$H\psi = i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t) - \mathbf{1}}{t} \psi \quad (8.8)$$

cuyo dominio es el conjunto de todos los vectores ψ para los cuales este limite existe.

Podemos esbozar algunas conclusiones inmediatas de las definiciones anteriores. La mas importante establece que un grupo unitario da la solución de una ecuación de Schrödinger apropiada, a saber una en la cual el Hamiltoniano H sea el generador de un grupo unitario.

Ecuación de evolución temporal: Sea $U(t)$ un grupo unitario con generador H y sea $\psi(t) = U(t)\psi$. Entonces, para toda ψ en el dominio del generador, $\psi(t)$ es una solución del problema de valor inicial:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H\psi(t), \quad \psi(0) = \psi \quad (8.9)$$

†

El enunciado anterior incluye la invariancia del dominio $D(H)$, bajo la acción del operador de evolución. Mas precisamente tenemos que:

$$U(t)D(H) \subset D(H), \quad HU(t) - U(t)H = 0, \text{ en } D(H)$$

Demostramos este hecho a continuación:

Si ψ esta en $D(H)$, entonces el limite (8.8) existe. Debido a que $U(t)$ es acotado y esta definido en todo \mathcal{H} el teorema 1.17 nos asegura que es también un operador continuo y por tanto conmuta con el limite:

$$U(t) \lim_{h \rightarrow 0} \frac{U(h) - \mathbf{1}}{h} \psi = \lim_{h \rightarrow 0} U(t) \frac{U(h) - \mathbf{1}}{h} \psi \quad (8.10)$$

$$= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{U(t+h) - U(t)}{h} \psi \quad (8.11)$$

$$= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{U(h) - \mathbf{1}}{h} U(t) \psi \quad (8.12)$$

Por tanto $U(t)\psi$ esta también en el dominio de H y $U(t)H\psi = HU(t)\psi$. En la ecuación (8.11) utilizamos la propiedad de grupo de los operadores unitarios y haciendo $U(t)\psi = \psi(t)$, notamos que esta expresión no es mas que la derivada de $\psi(t)$:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{U(t+h) - U(t)}{h} \psi = \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) \quad (8.13)$$

Con esto, que $\psi(t)$ y H cumplen con (8.9) es consecuencia inmediata de las ecuaciones (8.11) y (8.12) ya que:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = i \lim_{h \rightarrow 0} \frac{U(t+h) - U(t)}{h} \psi = i \lim_{h \rightarrow 0} \frac{U(h) - \mathbf{1}}{h} U(t) \psi = HU(t) \psi = H\psi(t) \quad (8.14)$$

□

Que el operador de evolución $U(t)$ sea unitario hace que el producto de dos estados ψ y ϕ (y por tanto la transición de probabilidad) sea independiente del tiempo:

$$(\psi(t), \phi(t)) = (\psi, \phi), \quad \forall t \quad (8.15)$$

Por lo tanto, tenemos que:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi(t), \phi(t)) = 0 \quad (8.16)$$

Desarrollando esta derivada y utilizando las propiedades del producto interno, obtenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\psi(t), \phi(t)) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(\psi(t+h), \phi(t+h)) - (\psi(t), \phi(t))}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(\psi(t+h), \phi(t+h)) + (-\psi(t), \phi(t+h)) - (\psi(t), -\phi(t+h)) - (\psi(t), \phi(t))}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \left(\frac{\psi(t+h) - \psi(t)}{h}, \phi(t+h) \right) - \lim_{h \rightarrow 0} \left(\psi(t), \frac{\phi(t) - \phi(t+h)}{h} \right) \end{aligned}$$

luego,

$$i \frac{\partial}{\partial t} (\psi(t), \phi(t)) = \left(i \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\psi(t+h) - \psi(t)}{h}, \phi(t+h) \right) - \left(\psi(t), i \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\phi(t+h) - \phi(t)}{h} \right)$$

De esta forma tenemos que,

$$i \frac{\partial}{\partial t} (\psi(t), \phi(t)) = (H\psi(t), \phi(t)) - (\psi(t), H\phi(t)) = 0$$

Por tanto, para que $U(t)$ sea unitario es necesario que:

$$(\psi, H\phi) = (H\psi, \phi), \quad \forall \psi, \phi \in D(H) \quad (8.17)$$

Esta propiedad de H es equivalente a que este operador sea simétrico.

8.4. Operadores simétricos

En la definición 6.1 introdujimos a los operadores simétricos, caracterizándolos como los operadores cuyo valor esperado es un número real para todo elemento de su dominio, el cual es denso en el espacio de Hilbert del sistema cuántico que se está estudiando. La siguiente definición da una nueva caracterización de este tipo de operadores la cual es equivalente a la anterior.

Definición 8.3. Diremos que un operador lineal H en un espacio de Hilbert \mathcal{H} es **simétrico** si su dominio es denso y si:

$$(\psi, H\phi) = (H\psi, \phi) \quad (8.18)$$

para todos los vectores ψ y ϕ en el dominio de H .

El siguiente resultado es una de las razones principales por las cuales el estudio de los operadores simétricos es tan importante en la teoría cuántica.

Teorema 8.4. Un operador simétrico solo tiene valores propios reales. Si ψ_1 y ψ_2 son dos vectores propios de un operador simétrico H pertenecientes a dos valores propios diferentes E_1 y E_2 , entonces ψ_1 y ψ_2 son ortogonales,

$$(\psi_1, \psi_2) = 0 \quad (8.19)$$

Demostración

Utilizando la propiedad anti lineal del producto interno tenemos que:

$$\langle H \rangle_\psi = \langle \psi, H\psi \rangle = \overline{\langle H\psi, \psi \rangle} \quad (8.20)$$

Esto implica que el valor esperado $\langle H \rangle_\psi$ de un operador simétrico es un número real. Si ψ es un vector propio (normalizado) de H con valor propio E , el valor esperado de H en este estado está dado por:

$$\langle H \rangle_\psi = \langle \psi, H\psi \rangle = E \langle \psi, \psi \rangle = E \|\psi\|^2 = E \quad (8.21)$$

por tanto E es un número real.

Consideremos dos vectores propios de H , ψ_1 y ψ_2 con valores propios diferentes E_1 y E_2 , entonces por la simetría de H , tenemos que:

$$\langle \psi_1, H\psi_2 \rangle = \langle H\psi_1, \psi_2 \rangle \quad (8.22)$$

pero esto implica que,

$$(E_1 - E_2) \langle \psi_1, \psi_2 \rangle = 0 \quad (8.23)$$

pero $E_1 - E_2 \neq 0$, por lo que necesariamente $\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = 0$. \square

8.5. El operador adjunto

Adjunto de un operador acotado

Si T es un operador lineal acotado, definido en todo el espacio de Hilbert \mathcal{H} ($T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$), su **operador adjunto** denotado por T^* , es el operador para el cual,

$$(\phi, T\psi) = (T^*\phi, \psi) \quad (8.24)$$

para toda $\phi, \psi \in \mathcal{H}$.

Al tomar el adjunto, podemos mover la acción del operador al otro lado del producto escalar. El adjunto de un operador lineal T es único, ya que de existir dos operadores adjuntos T^\dagger y T^* , tendríamos que:

$$(T^\dagger\phi, \psi) = (\phi, T\psi) = (T^*\phi, \psi), \quad \forall \phi, \psi \in \mathcal{H}$$

esto implica que:

$$(T^\dagger\phi - T^*\phi, \psi) = 0$$

$\forall \phi, \psi \in \mathcal{H}$, en particular para $\psi = T^\dagger\phi - T^*\phi$, haciendo que, $\|T^\dagger\phi - T^*\phi\| = 0$ y por tanto $T^\dagger\phi = T^*\phi$, $\forall \phi \in \mathcal{H}$.

Es fácil ver que T^* es un operador lineal, ya que por un lado:

$$(\phi_1 + \phi_2, T\psi) = (T^*(\phi_1 + \phi_2), \psi)$$

y por otro tenemos que:

$$(\phi_1 + \phi_2, T\psi) = (\phi_1, T\psi) + (\phi_2, T\psi) = (T^*\phi_1, \psi) + (T^*\phi_2, \psi) = (T^*\phi_1 + T^*\phi_2, \psi)$$

luego,

$$(T^*(\phi_1 + \phi_2), \psi) = (T^*\phi_1 + T^*\phi_2, \psi)$$

para toda $\psi \in \mathcal{H}$. Esto implica que:

$$T^*(\phi_1 + \phi_2) = T^*\phi_1 + T^*\phi_2 \quad (8.25)$$

así también $T^{**} = T$, ya que:

$$(\phi, T\psi) = (T^*\phi, \psi) = \overline{(\psi, T^*\phi)} = \overline{(T^{**}\psi, \phi)} = (\phi, T^{**}\psi) \quad (8.26)$$

$\forall \phi \in \mathcal{H}$.

El siguiente teorema muestra que el adjunto de un operador también es acotado.

Teorema 8.5. *Si T es un operador lineal acotado definido en todo el espacio de Hilbert \mathcal{H} , su operador adjunto T^* es acotado y sus normas son iguales:*

$$\|T\| = \|T^*\| \quad (8.27)$$

Demostración

Recordemos que la norma de un operador acotado esta dada por:

$$\sup_{\|\hat{\psi}\|=1} \|T\hat{\psi}\| = \|T\|$$

Sea $\hat{\psi} \in \mathcal{H}$ tal que $\|\hat{\psi}\| = 1$, entonces tomando el hecho de que $T = T^{**}$ y por la desigualdad de Schwarz tenemos que:

$$\|T^*\hat{\psi}\|^2 = |(T^*\hat{\psi}, T^*\hat{\psi})| = |(TT^*\hat{\psi}, \hat{\psi})| \leq \|TT^*\hat{\psi}\| \cdot \|\hat{\psi}\| \leq \|T\| \cdot \|T^*\hat{\psi}\| \cdot \|\hat{\psi}\|$$

de esta forma, $\|T^*\hat{\psi}\| \leq \|T\|$, $\forall \hat{\psi} \in \mathcal{H}$, tal que $\|\hat{\psi}\| = 1$.

Luego,

$$\|T^*\| = \sup_{\|\hat{\psi}\|=1} \|T^*\hat{\psi}\| \leq \|T\| \quad (8.28)$$

y por lo tanto T^* es acotado.

Por otro lado tenemos que:

$$\|T\hat{\psi}\|^2 = |(T\hat{\psi}, T\hat{\psi})| = |(T^*T\hat{\psi}, \hat{\psi})| \leq \|T^*T\hat{\psi}\| \cdot \|\hat{\psi}\| \leq \|T^*\| \cdot \|T\hat{\psi}\| \cdot \|\hat{\psi}\|$$

de esta forma $\|T\hat{\psi}\| \leq \|T^*\|$. Por tanto,

$$\|T\| = \sup_{\|\hat{\psi}\|=1} \|T\hat{\psi}\| \leq \|T^*\| \quad (8.29)$$

y podemos concluir que, $\|T\| = \|T^*\|$. □

Si T y S son dos operadores acotados definidos en todo el espacio, es fácil ver que:

$$(ST)^* = T^*S^*; (S+T)^* = S^*+T^*; (\alpha S)^* = \bar{\alpha}S^* \quad (8.30)$$

y tomando el complejo conjugado en la ecuación (8.24),

$$(T\phi, \psi) = (\phi, T^*\psi) \quad (8.31)$$

$\forall \phi, \psi \in \mathcal{H}$.

Adjunto de un operador unitario

Para un operador unitario tenemos:

$$(\phi, \psi) = (U\phi, U\psi) = (U^*U\phi, \psi) \quad (8.32)$$

para toda $\phi, \psi \in \mathcal{H}$. Por tanto $U^*U\phi = \phi$, para toda $\phi \in \mathcal{H}$ lo cual implica que $U^*U = \mathbf{1}$. Ya que el rango de U estado \mathcal{H} y U^* esta definido en todo este espacio, concluimos que $U^* = U^{-1}$. Esto nos lleva a dar la siguiente definición de operador unitario, la cual es completamente equivalente a las que hemos dado anteriormente:

Definición 8.6. *Un operador lineal acotado definido en todo el espacio de Hilbert \mathcal{H} es unitario, si y solo si,*

$$U^* = U^{-1} \quad (8.33)$$

es decir, $U^*U = UU^* = \mathbf{1}$.

Adjunto de un operador no acotado

Frecuentemente, los operadores que representan observables físicos no son operadores acotados (por ejemplo el operador derivada $\frac{d}{dx}$). Esto requiere que modifiquemos la definición anterior de adjunto para este tipo especial de operadores.

Definición 8.7. Sea T un operador lineal con dominio $D(T)$ el cual es denso en el espacio de Hilbert \mathcal{H} . Su operador adjunto es el operador lineal T^* , para el cual:

$$(\phi, T\psi) = (T^*\phi, \psi) \quad (8.34)$$

para toda $\psi \in D(T)$ y toda $\phi \in D(T^*)$.

El dominio de T^* esta definido de la siguiente manera: ϕ esta en $D(T^*)$, si y solo si, existe un vector $\xi \in \mathcal{H}$ tal que:

$$(\xi, \psi) = (\phi, T\psi), \quad \forall \psi \in D(T) \quad (8.35)$$

Esta es la definición mas general del dominio de un operador adjunto.

La condición de que el dominio $D(T)$ sea denso, garantiza que el vector ξ este determinado de forma única por ϕ [11], ya que de existir otro vector $\xi^* \in \mathcal{H}$ que cumpla la condición (8.35) tendríamos que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (\xi - \xi^*, \psi_n) = (\xi - \xi^*, \psi^*) = 0$$

para toda $\psi^* \in \mathcal{H}$, en donde $\{\psi_n\} \subset D(T)$, tal que $\psi_n \rightarrow \psi^*$, lo que implica $\xi = \xi^*$. De esta forma podemos definir sin ambigüedad $T^*\phi = \xi$.

El doble adjunto T^{**} , existe si el dominio $D(T^*)$ es denso. En este caso T^{**} es una extensión de T , es decir, un operador definido en un dominio mas grande que el de T pero cuyas evaluaciones coinciden en $D(T)$. La demostración de estos hechos hace uso del teorema de la grafica cerrada y de una teoría mas elaborada [9].

8.6. Operadores auto adjuntos y el teorema de Stone

Los operadores auto adjuntos son una clase especial de operadores simétricos con algunas restricciones sobre el dominio de su operador adjunto, las cuales pueden parecer insignificantes aunque son sin embargo importantes.

Definición 8.8. *Un operador lineal es auto adjunto si $D(T) = D(T^*)$ con,*

$$T^* = T \quad (8.36)$$

Es claro que los operadores auto adjuntos son una clase de operadores simétricos, ya que si $\psi, \phi \in D(T)$, entonces:

$$(\psi, T\phi) = (T^*\psi, \phi) = (T\psi, \phi)$$

†

Observamos que la definición de los operadores auto adjuntos requiere en particular que los dominios de T y T^* sean iguales. Si T es solo un operador simétrico (acotado o no acotado) entonces sabemos que:

$$(\phi, T\psi) = (T\phi, \psi), \quad \forall \phi, \psi \in D(T) \quad (8.37)$$

Recordando la definición del dominio del operador adjunto, concluimos que toda $\phi \in D(T)$, pertenece también al dominio de T^* y que,

$$T^*\phi = T\phi, \quad \forall \phi \in D(T) \quad (8.38)$$

Por tanto, si un operador es simétrico solo podemos concluir que $D(T) \subset D(T^*)$ y así el operador T^* es solo una extensión de T a un dominio mas grande. Notemos que según lo anterior, los operadores simétricos acotados definidos en todo el espacio, son auto adjuntos.

En general podemos decir que:

$$T \text{ es simétrico si } T = T^* \text{ en } D(T) \subset D(T^*) \quad (8.39)$$

$$T \text{ es auto adjunto si } T = T^* \text{ en } D(T) = D(T^*) \quad (8.40)$$

Un ejemplo de operador auto adjunto en el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$ es el operador de multiplicación por una función real $f(\mathbf{x})$. Ya que si,

$$\psi, \phi \in D(f) = \left\{ \xi \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid \int_{\mathbb{R}^n} |f(\mathbf{x}) \xi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} < \infty \right\}$$

entonces,

$$(\phi, f\psi) = \int_{\mathbb{R}^n} \phi(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) \bar{\psi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \bar{\psi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = (f\phi, \psi)$$

Por tanto, los operadores de posición \mathbf{x} y energía potencial $V(\mathbf{x})$, son auto adjuntos. Esto también es valido en el espacio de momentos para una función real $g(k)$, en particular el operador de momento es auto adjunto en este espacio. En el espacio de posiciones podemos ver a través del teorema de Fourier-Plancherel 4.3, que el operador de momento también es auto adjunto aquí:

$$(\phi, p\psi) = (\hat{\phi}, p\hat{\psi}) = (p\hat{\phi}, \hat{\psi}) = \overline{(\hat{\psi}, p\hat{\phi})} = \overline{(\psi, p\phi)} = (p\phi, \psi) \quad (8.41)$$

Si T es un operador simétrico pero no auto adjunto, puede suceder entonces que T^* no sea simétrico. En este caso el operador T^* puede tener incluso valores propios complejos.

Si el adjunto T^* resulta ser simétrico, entonces este operador resulta ser auto adjunto, es decir $T^{**} = T^*$ [9]. En este caso diremos que el operador T es **esencialmente auto adjunto**.

Una de las razones por las cuales los operadores auto adjuntos son tan importantes en la mecánica cuántica, es el teorema de Stone, el cual establece que existe una correspondencia uno a uno entre los grupos unitarios uniparametricos y los operadores auto adjuntos.

Teorema 8.9. (Stone) *Si $U(t)$ es un grupo unitario de un parámetro, entonces su generador H es un operador auto adjunto. así también, si H es un operador auto adjunto, este es el generador de un único grupo unitario de un parámetro $U(t)$.*

Para una demostración matemática rigurosa de este hecho nos referimos a [8] y a [9], ya que esta requiere de una teoría mas elaborada.

Usual mente al grupo unitario generado por el operador auto adjunto H se suele escribir como:

$$U(t) = e^{-iHt} \quad (8.42)$$

Esta notación tiene sentido en vista de que la ecuación de evolución asociada con $U(t)$ es la derivada temporal de la función exponencial de H :

$$i \frac{\partial}{\partial t} e^{-iHt} \psi = H e^{-iHt} \psi, \quad \forall \psi \in D(H) \quad (8.43)$$

sin embargo la razón de esta notación tiene sus raíces en el teorema espectral para operadores auto adjuntos, de donde se desprende de forma natural la definición de las funciones de operadores. Para el estudio de estas propiedades y del teorema espectral se requiere de una teoría del análisis funcional mas elaborada, para la cual nos referimos a [10].

Si ψ es una función propia de H con valor propio E , entonces:

$$e^{-iHt} \psi = e^{-iEt} \psi \quad (8.44)$$

Del algebra lineal conocemos el teorema espectral para operadores simétricos (Hermitianos) en espacios vectoriales de dimensión finita, el cual establece que siempre es posible formar una base ortonormal con los vectores propios correspondientes a este tipo de operadores. En el caso de los operadores lineales en espacios de dimensión finita es fácil ver que el dominio de los operadores y de los adjuntos asociados a estos es siempre el mismo. Sin embargo, en los espacios de dimensión infinita, tales como los espacios de Hilbert de funciones, hemos visto que esto no sucede siempre de esta forma en especial para los operadores simétricos, al menos que estos resulten ser auto adjuntos. Antes de establecer la definición formal de un observable físico de un sistema cuántico, introducimos las siguientes clases de operadores lineales.

Definición 8.10. *Diremos que un operador lineal $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, es de **rango finito** si puede ser representado como:*

$$T\psi = \sum_{i=1}^N (\phi_i, \psi) \xi_i, \quad (N < \infty) \quad (8.45)$$

en donde $\phi_1, \dots, \phi_N, \xi_1, \dots, \xi_N \in \mathcal{H}$.

Es claro que el rango de un operador de rango finito es el sub espacio de dimensión finita generado por el conjunto $\{\xi_1, \dots, \xi_N\} \subset \mathcal{H}$ y que $T\psi = 0$, si ψ es ortogonal al espacio generado por el conjunto $\{\phi_1, \dots, \phi_N\} \subset \mathcal{H}$. Por otro lado, todo operador cuyo rango sea de dimensión finita puede ser representado en la forma (8.45). Notemos que todo operador de rango finito es acotado.

Definición 8.11. Diremos que el operador acotado A es compacto, si existe una sucesión $\{T_n\}$ de operadores de rango finito, tal que,

$$\|A - T_n\| \rightarrow 0$$

cuando $n \rightarrow \infty$.

Si A es un operador compacto y auto adjunto, entonces es posible encontrar una base ortonormal $\{\hat{\psi}_i\}$ formada por vectores propios de A ($A\hat{\psi}_i = \lambda_i \hat{\psi}_i$, $\lambda \in \mathbb{R}$). Lo anterior se conoce como el **teorema espectral para operadores compactos** [15]. Para operadores auto adjuntos y no compactos tal base de vectores propios puede no existir. Ahora estamos listos para dar la definición formal de un observable físico.

Definición 8.12. En el formalismo de la mecánica cuántica un **observable** es un operador auto adjunto, cuyo conjunto de vectores propios forma una base ortonormal del espacio de Hilbert del sistema físico que se esta estudiando.

El teorema de Stone establece que a todo operador auto adjunto se le puede asociar un grupo unitario (y solo uno) de un parámetro, el cual describe la evolución temporal de un sistema físico. así, por la definición anterior tenemos que para todo observable físico podemos encontrar tal grupo unitario, en particular para el Hamiltoniano cuántico, con lo que la ecuación de Schrödinger y el problema de valor inicial asociado a esta, quedan establecidos sin ninguna ambigüedad.

A primera vista puede parecer que los operadores de posición y de momento no son observables después de todo, ya que anterior mente hemos visto que sus funciones propias no pertenecen a al espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$ al ser estas la función delta de Dirac:

$$\mathbf{x} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad (8.46)$$

$$\mathbf{k} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = \mathbf{k}_0 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \quad (8.47)$$

En donde, $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \delta(x - x_0) \cdot \delta(y - y_0) \cdot \delta(z - z_0)$.

Es fácil ver que estas funciones forman una base ortonormal, ya que por ejemplo si $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, entonces esta se puede ver como una superposición continua de funciones delta de Dirac de la siguiente forma:

$$\psi(x_0) = \int_{\mathbb{R}} \psi(x) \cdot \delta_x(x_0) dx = \int_{\mathbb{R}} \psi(x) \cdot \delta(x - x_0) dx \quad (8.48)$$

La generalización de lo anterior a \mathbb{R}^n es inmediata.

Sin embargo, debemos observar que la definición 8.12 no exige que los elementos que forman el conjunto de vectores propios de un observable (y por tanto la base del espacio de Hilbert) tengan que pertenecer necesariamente a este mismo espacio, por lo que podemos concluir que los operadores \mathbf{x} y \mathbf{p} , son en efecto observables de un sistema físico, pero debemos hacer notar que las funciones propias de estos, no pueden describir por si mismas el estado de un sistema cuántico ya que este necesariamente debe de ser parte del espacio de Hilbert que lo describe, en este caso $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Capítulo 9

Postulados de la mecánica cuántica

En los capítulos anteriores nos hemos dedicado a estudiar algunos de los aspectos matemáticos más importantes que dan forma y solides a la teoría cuántica, sin profundizar demasiado en el sentido físico que estos tienen. En este capítulo nos dedicaremos a crear la conexión entre los aspectos matemáticos más abstractos de la teoría cuántica que nos hemos encontrado hasta ahora, con lo que en verdad podemos apreciar en el mundo real por medio de mediciones y experimentos. Esta conexión quedará establecida a través de los seis postulados de la mecánica cuántica. Podemos decir que la interpretación física que establecen los primeros postulados ya a sido discutida en las secciones anteriores, sin embargo es importante mencionarlos para que no queden ambigüedades en lo que establecen los postulados restantes. Así también debemos destacar la generalidad de los siguientes postulados ya que estos son válidos para cualquier sistema cuántico, incluso para aquellos formados por más de una partícula.

9.1. Descripción del estado de un sistema

En las secciones anteriores introdujimos el concepto de estado cuántico, caracterizándolo por medio de una función de onda de cuadrado integrable, en un espacio de Hilbert apropiado. Esta función de onda describe en su totalidad a un sistema cuántico a un cierto tiempo t_0 y a través del operador de evolución es posible conocer el estado a cualquier otro tiempo de este sistema. Parte de esto se resume en el primer postulado de la mecánica cuántica, el cual (por su condición de postulado en esta teoría) es válido para **cualquier sistema físico**.

Primer postulado de la mecánica cuántica: Al tiempo t_0 el estado de un sistema físico está determinado por una función de onda $\psi(t_0)$ la cual pertenece a un cierto espacio de Hilbert \mathcal{H} .

†

El primer postulado establece que el estado de un sistema cuántico, al tiempo t_0 , solo puede ser representado a través de elementos del espacio de Hilbert \mathcal{H} . Por esta razón la función delta de Dirac, la cual como hemos visto anteriormente presume ser la función propia de los operadores de posición y de momento, no puede describir el estado cuántico de un sistema ya que esta no pertenece al espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$ (sin mencionar que con esta se violaría el principio de incertidumbre).

9.2. Descripción de cantidades físicas

En las secciones anteriores ya hemos estudiado las características que un operador lineal debe de cumplir para que este sea un observable, a saber este debe de ser auto adjunto y su conjunto de vectores propios debe de formar una base del espacio de Hilbert en el que estamos trabajando. Al decir que un operador es un *observable*, nos referimos a que este es capaz de darnos información física del sistema, la cual es posible verificar en la practica a través de mediciones o experimentos. El segundo postulado de la mecánica cuántica establece precisamente esto.

Segundo postulado de la mecánica cuántica: En un sistema físico, cualquier cantidad medible \mathcal{A} , es descrita por un operador auto adjunto A , el cual es un observable (def. 8.12) que actúa en el espacio de Hilbert del sistema.

A diferencia de la mecánica clásica, la cual describe estados como puntos en el espacio fase y observables como simples cantidades numéricas, la mecánica cuántica describe estados por medio de vectores de un espacio de Hilbert y observables a través de operadores que actúan en este mismo espacio.

9.3. Medición de cantidades físicas

Hemos visto que si el estado de un sistema físico es descrito por una función de onda ϕ la cual resulta ser una función propia del observable A con valor propio λ , entonces toda medición de A en este estado va a dar como resultado el valor λ . El tercer postulado de la mecánica cuántica generaliza lo anterior a cualquier posible estado de un sistema físico.

Tercer postulado de la mecánica cuántica: En un sistema cuántico, el único resultado posible de la medición de una cantidad física \mathcal{A} , es uno de los valores propios correspondientes de su observable asociado A .

†

Una medida de la cantidad física \mathcal{A} , va a dar siempre como resultado un número real, ya que por definición el observable A es simétrico. En caso de que el **espectro** de A (su conjunto de valores propios) se un conjunto discreto, diremos que la cantidad física \mathcal{A} esta **cuantizada**. En este punto debemos hacer notar que al decir, una medición de A , en realidad nos estamos refiriendo a una medición de la cantidad física asociada al operador (observable) A .

9.4. Principio de descomposición espectral

Por definición, el conjunto de funciones propias de un observable A forma una base ortonormal del espacio de Hilbert del sistema físico que estamos estudiando, por lo que todo posible estado de nuestro sistema (función de onda) puede ser escrito como una combinación lineal de estas funciones propias. Por el tercer postulado sabemos que el resultado de cualquier medición del observable A va a dar como resultado un valor propio de este, pero en el caso de un estado en general ¿cual de todos los posibles valores propios vamos a obtener como resultado de una medición? mas aun ¿Es posible predecir con certeza este valor? El cuarto postulado de la mecánica cuántica establece que podemos obtener cualquiera de estos valores, cada uno con cierta probabilidad.

Primero analizaremos el caso en el que el espectro del observable A es un conjunto discreto. Si todos

los valores propios λ_n de A son no degenerados, a cada uno de estos le corresponde una única función propia normalizada ϕ_n :

$$A\phi_n = \lambda_n \phi_n$$

Ya que el conjunto de funciones propias $\{\phi_n\}$ es una base, podemos escribir a cualquier estado ψ del sistema como:

$$\psi = \sum_n c_n \phi_n$$

En donde $c_n \in \mathbb{C}$.

Cuarto postulado de la mecánica cuántica(Espectro discreto no degenerando): Cuando la cantidad física \mathcal{A} es medida en un sistema físico en el estado normalizado ψ , la probabilidad $P(\lambda_n)$ de obtener el valor propio no degenerado λ_n , correspondiente al observable A , esta dada por:

$$P(\lambda_n) = |(\phi_n, \psi)|^2 \quad (9.1)$$

En donde (\cdot, \cdot) es el producto interno del espacio de Hilbert del sistema y ϕ_n es la función propia normalizada correspondiente al valor propio λ_n .

†

Ahora, si algunos de los valores propios del observable A son degenerados, a cada uno de estos le corresponde un conjunto de funciones propias ϕ_n^i :

$$A\phi_n^i = \lambda_n \phi_n^i, \quad \forall i = 1, 2, \dots, g_n$$

En donde g_n es el grado de degeneración del valor propio λ_n . Notemos que el conjunto de funciones propias ϕ_n^i de λ_n , es un conjunto ortonormal ya que este es subconjunto de una base ortonormal. El estado ψ puede ser representado en términos de la base ortonormal $\{\phi_n^i\}$ forma de la siguiente forma:

$$\psi = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i \phi_n^i$$

En donde $c_n^i \in \mathbb{C}$. Es claro que cuando $g_n = 1$, tenemos el caso de un valor propio no degenerado, por lo que la expresión anterior es el caso general de la descomposición de un estado en términos de las funciones propias de un observable. La siguiente versión del cuarto postulado es el caso general para un observable con espectro discreto.

Cuarto postulado de la mecánica cuántica(Espectro discreto): Cuando la cantidad física \mathcal{A} es medida en un sistema físico en el estado normalizado ψ , la probabilidad $P(\lambda_n)$ de obtener el valor propio λ_n correspondiente al observable A , esta dada por:

$$P(\lambda_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |(\phi_n^i, \psi)|^2 \quad (9.2)$$

En donde g_n es el grado de degeneración de λ_n y $\{\phi_n^i\}_{i=1}^{g_n}$ es el conjunto de vectores propios ortonormales de A con valor propio λ_n .

†

Es fácil ver que la probabilidad de obtener algún valor propio como resultado de una medición del observable A es igual a uno, ya que:

$$\sum_n P(\lambda_n) = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |(\phi_n^i, \psi)|^2 = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 = \|\psi\|^2 = 1$$

Es claro que si ϕ es una función propia de A con valor propio λ , entonces:

$$P(\lambda) = |(\phi, \phi)|^2 = 1$$

y que para cualquier otro valor propio $\beta \neq \lambda$ correspondiente a la función propia ξ :

$$P(\beta) = |(\xi, \phi)|^2 = 0$$

ya que ϕ y ξ son parte de un conjunto ortonormal.

9.5. Reducción del paquete de ondas

Supongamos que a un cierto tiempo queremos medir una cantidad física \mathcal{A} en un sistema cuántico, el cual justo antes de la medición está descrito por la función de onda normalizada ψ . Como vimos anteriormente, el cuarto postulado nos permite calcular las probabilidades de obtener los diferentes valores posibles de esta medición, pero es claro que cuando esta es realizada obtendremos solamente un valor. Inmediatamente después de realizar la medición del observable ya no podemos hablar de la probabilidad de obtener uno u otro valor en una medición, debido a que ya hemos obtenido uno en concreto. Por tanto, ahora poseemos más información acerca del estado del sistema, por lo cual es entendible que el estado de este después de la medición, el cual incorpora esta nueva información, sea diferente del estado inicial descrito por ψ .

Consideremos primero el caso en el que una medición del observable A , da como resultado a un valor propio no degenerado λ_n . De esta forma postulamos ahora que el estado del sistema inmediatamente después de la medición de A , va a estar descrito por la función propia ϕ_n asociada al valor propio λ_n :

$$\psi \xrightarrow{\lambda_n} \phi_n$$

Si realizamos una segunda medición de \mathcal{A} inmediatamente después de la primera (antes de que el sistema tenga tiempo de evolucionar) vamos a obtener como resultado el mismo valor λ_n ya que el estado del sistema inmediatamente antes de la segunda medición ya está dado por la función de onda ϕ_n y no por ψ .

Cuando una medición da como resultado un valor propio degenerado λ_n , es posible generalizar la discusión anterior de la siguiente forma. Si escribimos al estado ψ , el cual describe al sistema justo antes de la medición en términos de los vectores propios del observable A ,

$$\psi = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i \phi_n^i$$

tenemos que la modificación de la función de onda justo después de la medición está dada por:

$$\psi \xrightarrow{\lambda_n} \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2}} \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i \phi_n^i \quad (9.3)$$

definimos a la función ψ_n , como:

$$\psi_n = \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i \phi_n^i$$

la cual, es la proyección de la función de onda ψ sobre el sub espacio propio de las funciones propias ϕ_n^i , asociadas al valor λ_n . Notemos que ψ_n es también una función propia de A . De esta forma, definimos también al operador de proyección P_n asociado al sub espacio propio del valor λ_n el cual actúa de la siguiente forma:

$$P_n \psi = \psi_n$$

así podemos describir a de la siguiente forma:

$$\psi \xrightarrow{\lambda_n} \frac{P_n \psi}{\|P_n \psi\|} \quad (9.4)$$

Todo lo anterior se resume en el siguiente postulado.

Quinto postulado de la mecánica cuántica: Si la medición de una cantidad física \mathcal{A} en un sistema en el estado normalizado ψ da como resultado el valor λ_n , el estado del sistema inmediatamente después de la medición esta dado por la **proyección normalizada**,

$$\psi \xrightarrow{\lambda_n} \frac{P_n \psi}{\|P_n \psi\|} \quad (9.5)$$

de ψ sobre el sub espacio propio del valor λ_n .

†

Por tanto, el estado de un sistema físico inmediatamente después de una medición es siempre una función propia del observable A con valor propio λ_n . Debemos remarcar el hecho de que en el caso degenerado, el vector propio al cual se reduce el estado ψ después del proceso de medición, es solo la *parte* de ψ que pertenece al sub espacio propio correspondiente al valor λ_n .

Proyecciones y propiedades

Un operador de proyección ortogonal, es un operador auto adjunto acotado P que solo tiene como valores propios a 0 y 1. Por tanto, esta caracterizado por la propiedad $P^2 = P = P^*$. El observable físico representado por un operador de proyección, describe cuando un sistema posee cierta propiedad o no. El medir si un sistema tiene o no una propiedad, solo puede dar los resultados *si* (valor propio 1) o *no* (valor propio 0). El rango de P , esto es el sub espacio propio correspondiente al valor propio 1, es el sub espacio de estados que si poseen esta propiedad, mas aun, para $\psi \in \text{Ran}(P)$, $P\psi = \psi$. Es fácil ver de la definición [15], que estos operadores cumplen con la propiedad:

1. $\|P\| = 1$, siempre que $P \neq 0$.
2. $(\phi, P\psi) = (P\phi, P\psi)$

Otra propiedad importante de este tipo de operadores, es que el conjunto de todas las proyecciones ortogonales de un espacio de Hilbert \mathcal{H} , tiene una relación uno a uno, con el conjunto de todos los sub espacios de \mathcal{H} , es mas, el conjunto $\text{Ran}(P)$ es un sub espacio de \mathcal{H} [15].

Para cada observable A , existe una única familia de operadores de proyección $\{P_B(A) | B \subset \mathbb{R}, \text{medible}\}$. El operador de proyección $P_B(A)$ describe si el observable A tiene un valor en el conjunto $B \subset \mathbb{R}$ o no, cuando es aplicado a un cierto estado ψ .

9.6. Evolución temporal de los sistemas cuánticos

En las secciones anteriores ya hemos introducido a la ecuación general de Schrödinger para una partícula en unidades en las cuales tanto \hbar como la masa eran iguales a uno. Es en este punto en el que la introduciremos en el caso general con las unidades estándar.

Sexto postulado de la mecánica cuántica: La evolución temporal de la función de onda $\psi(t)$ esta dada por la ecuación de Schrödinger:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H\psi(t) \quad (9.6)$$

en donde H es el observable Hamiltoniano asociado con la energía total del sistema, el cual actúa como:

$$H\psi = -\frac{1}{2}\Delta\psi + V(\mathbf{x})\psi \quad (9.7)$$

†

Capítulo 10

Sistemas compuestos

Hasta este momento (aparte de los seis postulados de la mecánica cuántica) solo hemos considerado sistemas formados por una sola partícula. Sin embargo, los verdaderos problemas físicos comienzan cuando consideramos sistemas formados al menos por dos partículas. En este capítulo, como un primer ejemplo, consideraremos a la ecuación de Schrödinger para dos partículas libres, con lo cual mostraremos como construir estados cuánticos para sistemas de dos partículas como el producto de dos estados de una sola partícula. La formulación abstracta de este método esta dada por el producto tensorial entre espacios de Hilbert. así el espacio de Hilbert de un sistema cuántico compuesto, esta dado por el producto tensorial de los espacios de Hilbert de los sistemas individuales. Como hemos visto con anterioridad, el producto tensorial de espacios de Hilbert no solo contiene al producto tensorial de sus elementos, si no que también contiene a sus combinaciones lineales y que es en realidad la cerradura de este ultimo conjunto. Es por esta razón que los estados de los sistemas cuánticos compuestos son, en general, **estados entrelazados** esto es, estados que no pueden ser expresados siempre como el producto tensorial de elementos de los respectivos espacios de Hilbert de los sistemas individuales. Veremos que el entrelazamiento de los sistemas no es creado debido a procesos de medición locales o manipulando a los sistemas individuales, si no que mas bien este solo puede ser creado por medio de las interacciones entre los sistemas individuales.

10.1. Estados de sistemas de dos partículas

El Hamiltoniano para dos partículas libres

Para introducir la noción de la función de onda para un sistema de dos partículas, consideraremos un sistema de dos partículas libres las cuales no interactúan de ninguna forma entre ellas. Por razones que aclararemos mas adelante, supondremos que las partículas no son idénticas y que pueden ser distinguidas por alguna propiedad física (por ejemplo, su masa puede ser diferente $m_1 \neq m_2$). Mas aun, supondremos que el espacio de Hilbert de cada una de las partículas es $L^2(\mathbb{R}^n)$. Vamos a utilizar las reglas de sustitución (ecs. (6.17),(6.18),(6.19)) para formular el Hamiltoniano cuántico correspondiente a este sistema compuesto, a partir del Hamiltoniano clásico para dos partículas libres. De las soluciones de la ecuación de Schrödinger que obtengamos con este Hamiltoniano, vamos a aprender como es la estructura típica de las funciones de onda de sistemas de dos partículas.

Suponiendo que cada partícula se mueve en un espacio de n dimensiones, el espacio de configuración clásico de este sistema de dos partículas es \mathbb{R}^{2n} . Los puntos $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$, en este espacio describen la configuración del sistema, esto es, las posiciones \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 de las partículas individuales. El Hamiltoniano de este sistema se obtiene a través de la expresión clásica de la energía por medio de las reglas de sustitución, de la siguiente forma; El operador de momento \mathbf{p}_j para la partícula j esta

dada por el operador diferencial $-i\hbar\nabla_j$, (gradiente respecto a las coordenadas \mathbf{x}_j). El Hamiltoniano es entonces la suma de la energía cinética de las dos partículas, esto es,

$$H = \frac{(\mathbf{p}_1)^2}{2m_1} + \frac{(\mathbf{p}_2)^2}{2m_2} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 \quad (10.1)$$

En donde m_1 y m_2 son las masas de las partículas respectivamente. Aquí suponemos que las partículas se mueven libremente, ya que no tenemos un término de energía potencial el cual pueda describir, en particular, alguna interacción entre las dos partículas.

El operador lineal H actúa sobre funciones diferenciables $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ de $2n$ variables de posición. El operador Δ_j es el operador de Laplace el cual se diferencia respecto a las variables $\mathbf{x}_j = (x_j^{(1)}, \dots, x_j^{(n)})$,

$$\Delta_j = \frac{\partial^2}{\partial(x_j^{(1)})^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial(x_j^{(n)})^2}, \quad \text{con } j = 1, 2$$

Ecuación de Schrödinger para un sistema de dos partículas

Consideremos a la ecuación general de Schrödinger dependiente del tiempo con el Hamiltoniano para dos partículas obtenido anteriormente. Re escalando las unidades de longitud, podemos deshacernos de la constante \hbar y escribir a la ecuación de Schrödinger como,

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = -\left(\frac{1}{2m_1}\Delta_1 + \frac{1}{2m_2}\Delta_2\right)\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) \quad (10.2)$$

Notamos que el Hamiltoniano es la suma de dos términos que conmutan el uno con el otro. Por tanto, podemos encontrar un conjunto especial de soluciones de esta ecuación por el método de separación de variables, haciendo:

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = \psi_1(\mathbf{x}_1, t) \cdot \psi_2(\mathbf{x}_2, t) \quad (10.3)$$

con $\psi \in L^2(\mathbb{R}^{2n})$, $\|\psi\| = 1$ Es fácil ver que si la solución de la ecuación (10.2) es de la forma (10.3) entonces las funciones ψ_1 y ψ_2 son las funciones de onda libres de las partículas uno y dos respectivamente. Esto se puede hacer de la siguiente forma; Según la interpretación estadística de la función de onda en número $|\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)|^2$ expresa la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula uno en la posición \mathbf{x}_1 y a la partícula 2 en la posición \mathbf{x}_2 al tiempo t . De esta forma la probabilidad de que la partícula uno se encuentre en la región $A \subset \mathbb{R}^n$ y que la partícula dos se encuentre en la región $B \subset \mathbb{R}^n$ al tiempo t esta dada por:

$$P(A, B) = \int_B \int_A |\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)|^2 d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 = \int_A |\psi_1(\mathbf{x}_1, t)|^2 d\mathbf{x}_1 \cdot \int_B |\psi_2(\mathbf{x}_2, t)|^2 d\mathbf{x}_2 \quad (10.4)$$

Luego de esta expresión observamos que la densidad de probabilidad de que la partícula uno se encuentre en la posición \mathbf{x}_1 mientras que la partícula dos esta *en cualquier lugar* del espacio, esta dada por:

$$\rho_1(\mathbf{x}_1) = \int_{\mathbb{R}^n} |\psi_2(\mathbf{x}_2, t)|^2 d\mathbf{x}_2 \cdot |\psi_1(\mathbf{x}_1, t)|^2 \quad (10.5)$$

pero tomando el hecho de que la función $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ esta normalizada la expresión anterior se puede describir como:

$$\rho_1(\mathbf{x}_1) = 1 \cdot |\psi_1(\mathbf{x}_1, t)|^2 = |\psi_1(\mathbf{x}_1, t)|^2 \quad (10.6)$$

y por tanto, ya que las partículas no son afectadas por ningún potencial y no interactúan entre si de ninguna manera, podemos concluir que $\psi_1(\mathbf{x}_1, t)$ es la función de onda libre de la partícula uno

y utilizando un argumento completamente análogo tenemos que $\psi_2(\mathbf{x}_2, t)$ es también la función de onda libre de la partícula dos. De esta forma, ambas funciones deben de ser solución de las ecuaciones libres:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_1(\mathbf{x}_1, t) = -\frac{1}{2m_1}\Delta_1\psi_1(\mathbf{x}_1, t) \quad (10.7)$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_2(\mathbf{x}_2, t) = -\frac{1}{2m_2}\Delta_2\psi_2(\mathbf{x}_2, t) \quad (10.8)$$

Ahora, probemos que la función (10.3) con ψ_1 y ψ_2 satisfaciendo (10.7) y (10.8) respectivamente, es en efecto una solución de la ecuación (10.2). Sustituyendo a (10.3) en la ecuación (10.2) y desarrollando las derivadas obtenemos:

$$i\frac{\partial\psi_1}{\partial t}\psi_2 + i\frac{\partial\psi_2}{\partial t}\psi_1 = -\psi_2\left(\frac{1}{2m_1}\Delta_1\psi_1\right) - \psi_1\left(\frac{1}{2m_2}\Delta_2\psi_2\right) \quad (10.9)$$

$$\psi_2\left[i\frac{\partial\psi_1}{\partial t} + \frac{1}{2m_1}\Delta_1\psi_1\right] = -\psi_1\left[i\frac{\partial\psi_2}{\partial t} + \frac{1}{2m_2}\Delta_2\psi_2\right] = 0 \quad (10.10)$$

De esta forma hemos mostrado que $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = \psi_1(\mathbf{x}_1, t) \cdot \psi_2(\mathbf{x}_2, t)$ es solución de (10.2), si y solo si, ψ_1 y ψ_2 son soluciones libres de las partículas uno y dos respectivamente.

Concluimos que la ecuación de Schrödinger para dos partículas libres puede ser separada completamente en dos problemas independientes de una sola partícula. Esto no debería ser una sorpresa, ya que un sistema de dos partículas no interactuantes consiste de subsistemas completamente independientes de una sola partícula. Mas aun, cada una de las partículas se mueve como si la otra no estuviera ahí.

Si ψ y ϕ son soluciones de la ecuación de Schrödinger para dos partículas, entonces cualquier combinación lineal $a\psi + b\phi$, es de nuevo una solución (principio de superposición y linealidad de la ecuación de Schrödinger). Debemos observar sin embargo que aunque las dos soluciones ψ y ϕ pueden estar expresadas como el producto de funciones de onda de sistemas individuales (tal y como sucede con la solución (10.3)) en general, es imposible expresar a la combinación lineal $a\psi + b\phi$ de nuevo como un producto de funciones de onda de los sistemas individuales. Por tanto la ecuación de Schrödinger para dos partículas tiene tantas soluciones, las cuales no son solamente el producto de funciones de onda de una sola partícula.

El espacio de Hilbert de un sistema de dos partículas

Para un sistema de dos partículas ¿Cual es la forma mas general de la función de onda a un cierto tiempo t ?

Supongamos que el conjunto $\{\psi_j | j = 1, 2, \dots\}$ es una base ortonormal del espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$ de una sola de partículas. Entre los posibles estados del sistema de dos partículas están todos los productos de la forma:

$$\psi_j(\mathbf{x}_1)\psi_k(\mathbf{x}_2), \quad j, k = 1, 2, 3, \dots \quad (10.11)$$

y ya que el conjunto de todos los posibles estados es un espacio lineal (principio de superposición), podemos formar combinaciones lineales arbitrarias de estos productos, mas aun, por la proposición 2.27 y el teorema 3.10, sabemos que el conjunto de todos los productos de la forma (10.11) forma una base del espacio $L^2(\mathbb{R}^{2n})$. así, la función mas general para un sistema de dos partículas tiene la forma:

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} c_{jk}\psi_j(\mathbf{x}_1)\psi_k(\mathbf{x}_2) \quad (10.12)$$

Esta es una función de cuadrado integrable de las $2n$ variables $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\}$, siempre que la doble suma converja con respecto a la norma de $L^2(\mathbb{R}^{2n})$. Para que esto se cumpla solo es necesario que la suma del modulo cuadrado de los coeficientes c_{jk} sea finita:

$$\sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} |c_{jk}|^2 < \infty \quad (10.13)$$

En este caso, la función de onda ψ para el sistema de dos partículas, es de cuadrado integrable sobre \mathbb{R}^{2n} , con norma:

$$\|\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^{2n}} |\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2 d^{2n}x = \sum_{jk} |c_{jk}|^2 < \infty \quad (10.14)$$

En general, no es posible describir a una combinación lineal de productos de funciones, como el simple producto de dos funciones de onda de las partículas individuales. La discusión anterior la resumimos a continuación.

El espacio de Hilbert de un sistema de dos partículas Si el espacio de estados de una sola partícula es $L^2(\mathbb{R}^n)$, entonces el espacio de Hilbert de las funciones de onda para un sistema de dos partículas es $L^2(\mathbb{R}^{2n})$. Si $\{\psi_k | k = 1, 2, \dots\}$ es una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R}^n)$, entonces el conjunto $\{\psi_{jk} | \psi_{jk} = \psi_j(\mathbf{x}_1)\psi_k(\mathbf{x}_2), j, k = 1, 2, \dots\}$ es una base ortonormal del espacio de Hilbert del sistema de dos partículas.

†

A cualquier tiempo t , la función de onda mas general es por tanto un combinación lineal (posiblemente infinita) de productos de funciones de onda de una sola partícula.

Interpretación de la función de onda para un sistema de dos partículas

Análogamente a la interpretación de la función de onda de una sola partícula, decimos que:

$$\int_{B \subset \mathbb{R}^{2n}} |\psi(\mathbf{x}_1)|^2 d^{2n}x \quad (10.15)$$

es probabilidad de encontrar la configuración $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ en la región $B \subset \mathbb{R}^{2n}$. La elección natural de la región B es la de un rectángulo $B_1 \times B_2$, con $B_j \subset \mathbb{R}^n$. La expresión anterior da la probabilidad de encontrar a la partícula uno en la región B_1 y a la partícula dos en la región B_2 . En el caso especial de que la función de onda sea un producto, esta probabilidad también se convierte en un producto:

$$\int_{B \subset \mathbb{R}^{2n}} |\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2 d^{2n}x = \int_{B_1} |\psi_1(\mathbf{x})|^2 d^n x \int_{B_2} |\psi_2(\mathbf{x})|^2 d^n x \quad (10.16)$$

Esta es la probabilidad de la unión de los eventos $E_1 = \text{“La partícula 1 esta en } B_1\text{”}$ y $E_2 = \text{“La partícula 2 esta en } B_2\text{”}$. Si la función de onda no es un producto, la probabilidad de la unión de estos eventos no se factorizará, lo cual significa que los eventos E_1 y E_2 no son independientes.

A la cantidad,

$$\rho_1(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^n} |\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 d\mathbf{y} \quad (10.17)$$

la conoceremos como la función de densidad de la partícula uno. Interpretamos a $\rho_1(\mathbf{x})$ como la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula uno en la posición \mathbf{x} mientras que la partícula dos se encuentra en cualquier lugar del espacio. así, $\int_{B_1} \rho_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ es la probabilidad de que la posición

de la partícula uno este en la región B_1 independientemente de la posición de la partícula 2. De forma similar definimos,

$$\rho_2(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^n} |\psi(\mathbf{y}, \mathbf{x})|^2 d\mathbf{y} \quad (10.18)$$

como la densidad de probabilidad de posición de la partícula dos, independientemente de la posición de la partícula uno. Cuando ψ sea el producto de funciones de onda normalizadas de una sola partícula, las cantidades ρ_1 y ρ_2 son solamente las correspondientes densidades de una sola partícula:

$$\rho_1(\mathbf{x}) = |\psi_1(\mathbf{x})|^2, \quad \rho_2(\mathbf{x}) = |\psi_2(\mathbf{x})|^2, \quad \text{si } \psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \psi_1(\mathbf{x})\psi_2(\mathbf{y}) \quad (10.19)$$

10.2. El espacio de Hilbert de un sistema binario

Consideremos de forma general a un sistema cuántico el cual esta compuesto de dos partes diferentes A y B (esto es llamado un sistema binario). Ahora ¿Como construimos el formalismo matemático del sistema compuesto sabiendo como describir las partes que lo forman? Este era precisamente el problema que teníamos que resolver cuando introdujimos la función de onda de para un sistema formado por dos partículas libres. Resolvimos este problema introduciendo un espacio de Hilbert mas grande, el cual contiene los productos de las funciones de onda de una sola partícula. Estas mismas ideas se pueden utilizar para sistemas cuánticos en general.

Construcción del espacio de Hilbert de un sistema binario

Consideramos dos sistemas físicos A y B . Denotamos a los espacios de Hilbert de los sistemas individuales como \mathcal{H}^A y \mathcal{H}^B , respectivamente. Cuando unimos las dos partes, tenemos que encontrar un espacio de Hilbert mas grande en cual sea capaz de describir los estados del sistema compuesto. La forma de la función de onda (10.11) para un sistema de dos partículas sugiere que los estados del sistema compuesto deben de ser el producto de estados individuales. Matemáticamente hablando, el producto tensorial provee un buen método para construir un espacio de Hilbert que contenga a todos los productos posibles entre elementos de los dos espacios \mathcal{H}^A y \mathcal{H}^B :

$$\psi^A \otimes \psi^B; \quad \psi^A \in \mathcal{H}^A, \psi^B \in \mathcal{H}^B$$

Al espacio de Hilbert del sistema compuesto lo construiremos a partir de elementos de esta forma ya que al estar trabajando con espacios de Hilbert en general, la multiplicación de dos funciones de onda $\psi^A\psi^B$, puede no tener ningún sentido, ya que los espacios de Hilbert a los que pertenecen cada una de estas, pueden ser muy diferentes entre si. Si embargo, este no es el caso de los espacios $L^2(\mathbb{R}^n)$ tal y como lo hemos visto y manejado anteriormente (teorema 3.10). Debemos hacer notar que en general, el producto tensorial $\psi_A \otimes \psi_B$ solo representa una pareja ordenada de estados ψ_A y ψ_B .

Los estados producto de la forma $\psi_A \otimes \psi_B$ no pueden ser los únicos estados posibles del sistema compuesto. De acuerdo con el principio de superposición, también debemos incluir a todas las combinaciones lineales de este tipo de productos en el espacio de estados del sistema compuesto AB , mas aun también debemos de considerar a los elementos de la cerradura de este ultimo conjunto. Por tanto podemos concluir, que el espacio de Hilbert correspondiente a un sistema binario formado por los subsistemas A y B , es el producto tensorial de los espacios de Hilbert \mathcal{H}^A y \mathcal{H}^B , al cual denotamos por:

$$\mathcal{H}^{AB} = \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$$

La introducción del producto tensorial para la descripción de sistemas compuestos es un ingrediente básico nuevo en la teoría de la mecánica cuántica.

Suposición básica acerca de los sistemas compuestos: El espacio de Hilbert de un sistema cuántico formado por dos subsistemas A y B , es el producto tensorial de los espacios de Hilbert \mathcal{H}^A y \mathcal{H}^B de cada uno de estos subsistemas.

†

Estados entrelazados

Siempre que el estado de un sistema binario sea un estado producto, esto es, un estado que puede ser escrito como:

$$\psi = \psi^A \otimes \psi^B; \quad \psi^A \in \mathcal{H}^A, \psi^B \in \mathcal{H}^B \quad (10.20)$$

podemos decir que el sistema A se encuentra en el estado ψ^A y que el sistema B se encuentra en el estado ψ^B . El estado $\psi^A \otimes \psi^B$, del sistema compuesto, se obtiene si los dos subsistemas son preparados por separado en los estados ψ^A y ψ^B respectivamente y luego son yuxtapuestos sin que estos interaccionen.

Pero en el espacio de Hilbert del sistema compuesto, muchos de los estados no pueden ser escritos como un simple producto tensorial. Por ejemplo, el producto tensorial,

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0^A \otimes \psi_0^B + \psi_1^A \otimes \psi_1^B)$$

no es un estado producto, al menos si suponemos que los conjuntos $\{\psi_0^A, \psi_1^A\}$, $\{\psi_0^B, \psi_1^B\}$, son linealmente independientes.

Estados entrelazados y separables: Diremos que un sistema compuesto se encuentra en un **estado entrelazado**, si su estado no puede ser escrito como un solo producto tensorial de los estados de los subsistemas que lo componen. A un estado de la forma (10.20) lo conoceremos como un estado **no entrelazado** o **separable**.

†

Incluso si el estado inicial de un sistema compuesto es un estado separable, este en general, se puede transformar en un estado entrelazado durante su evolución temporal, si existe alguna interacción o acoplamiento entre los subsistemas. Siempre que un sistema compuesto se encuentre en un estado entrelazado, no tiene ningún sentido el querer hablar del *estado en el que se encuentra uno de sus subsistemas*, en el sentido que hemos utilizado hasta ahora (esto es, como algo que puede ser descrito por un solo vector del espacio de Hilbert del subsistema). Es por esta razón que nos vemos forzados a generalizar nuestra noción del estado de un sistema.

10.3. partículas interactuantes

Interacción entre dos partículas

Resulta ser que los estados entrelazados tienen algunas propiedades que a primera vista, resultan ser muy extrañas. Por tanto, uno debe preguntar si los estados entrelazados pueden existir realmente en la naturaleza. Para sistemas de partículas no interactuantes, podemos evitar el hablar de estados entrelazados, siempre que escojamos las condiciones iniciales apropiadas, esto es, escogiendo un estado inicial separable del sistema compuesto, ya que en este caso al evolucionar el sistema, el estado de este va a permanecer siendo un estado separable. Pero, en el caso de las partículas interactuantes, esto ya no es lo que sucede y el entrelazamiento de los subsistemas no puede ser evitado.

El Hamiltoniano para un sistema de dos partículas interactuantes se obtiene de su análogo clásico (regla de substitución). Este (en unidades en las que $\hbar = 1$) tiene la forma:

$$H = -\frac{1}{2m_1}\Delta_1 - \frac{1}{2m_2}\Delta_2 + V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \quad (10.21)$$

en donde $\Delta^{(j)}$ es el Laplaciano actuando sobre las coordenadas de la partícula j . Consideremos como ejemplo al átomo de helio. En la aproximación de masa nuclear infinita, el núcleo atómico es un centro puntual fijo de una fuerza Coulombiana (con carga $2e$). El átomo de helio tiene dos electrones que interactúan a través de la repulsión Coulombiana. La energía potencial electrostática de los dos electrones puede ser entonces descrita por la expresión,

$$V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = -\frac{2\gamma}{|\mathbf{x}_1|} - \frac{2\gamma}{|\mathbf{x}_2|} + \frac{\gamma}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \quad (10.22)$$

en donde $\gamma = e^2/4\pi\epsilon_0$. Los dos primeros sumandos describen la energía potencial electrostática de los electrones en el campo del núcleo y el ultimo termino es la repulsión Coulombiana entre los dos electrones. La presencia del ultimo termino hace que sea imposible obtener una solución de la ecuación de Schrödinger con la forma de un producto de funciones de onda de una sola partícula (esto es, en la forma de un estado separable). Incluso si el estado inicial es separable, la evolución temporal llevara al sistema a un estado entrelazado.

Separación del movimiento del centro de masa

Un caso especial de (10.21) es cuando tenemos un Hamiltoniano de la forma:

$$H = -\frac{1}{2m_1}\Delta_1 - \frac{1}{2m_2}\Delta_2 + V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \quad (10.23)$$

Aquí, la energía potencial depende únicamente de la posición relativa de las dos partículas. Un Hamiltoniano como este puede aparecer por ejemplo, en la descripción del átomo de hidrogeno, en donde el protón no es tratado como un centro de fuerza fijo, sino como una partícula cuántica. El átomo de hidrogeno consiste de un protón con masa m_p y de un electrón con masa m_e . Estas partículas interactúan a través de una fuerza Coulombiana atractiva, que depende solamente de la distancia entre el protón y el electrón. Por tanto el Hamiltoniano para el átomo de hidrogeno tiene la forma,

$$H = -\frac{1}{2m_1}\Delta_1 - \frac{1}{2m_2}\Delta_2 - \frac{\gamma}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}$$

De nuevo, en este caso la evolución temporal no preserva la separabilidad de las funciones de onda. Pero podemos encontrar otro conjunto de coordenadas, en las que la separación a un estado producto es posible.

Comenzado con las coordenadas cartesianas $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ del sistema de dos partículas (podemos suponer que estas son las coordenadas del sistema de referencia del *laboratorio* en el que estamos realizando las mediciones), introducimos a la **coordenada del centro de masa \mathbf{X}** y a la coordenada relativa \mathbf{x} , dadas por:

$$\mathbf{X} = \frac{m_1\mathbf{x}_1 + m_2\mathbf{x}_2}{m_1 + m_2} ; \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \quad (10.24)$$

Después de realizar la transformación de coordenadas $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \rightarrow (\mathbf{X}, \mathbf{x})$, el Hamiltoniano (10.23), se descomponen en una parte que depende solamente de \mathbf{X} y en otra parte que depende solamente de \mathbf{x} ,

$$H = -\frac{1}{2M}\Delta_{\mathbf{X}} - \frac{1}{2\mu}\Delta_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x}) \quad (10.25)$$

en donde M , es la masa total y μ es la masa reducida:

$$M = m_1 + m_2 ; \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (10.26)$$

Los símbolos $\Delta_{\mathbf{X}}$ y $\Delta_{\mathbf{x}}$ denotan al operador de Laplace respecto a las coordenadas \mathbf{X} y \mathbf{x} respectivamente.

Entonces, hemos encontrado una nueva forma de descomponer al sistema de dos partículas, en dos subsistemas. Uno de estos subsistemas describe el movimiento libre del centro de masa, el cual es dado por el Hamiltoniano,

$$H_{cm} = -\frac{1}{2M}\Delta_{\mathbf{X}} \quad (10.27)$$

El otro subsistema describe el movimiento relativo. Este subsistema es descrito por el Hamiltoniano,

$$H_{rel} = -\frac{1}{2\mu}\Delta_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x}) \quad (10.28)$$

el cual es el mismo Hamiltoniano que se tendría para una sola partícula de masa μ con una energía potencial externa $V(\mathbf{x})$. El Hamiltoniano del sistema de dos partículas es entonces la suma,

$$H = H_{cm} + H_{rel} \quad (10.29)$$

Ya que los dos sumandos anteriores conmutan entre si, la evolución temporal del sistema compuesto esta dada por,

$$e^{-iHt} = e^{-iH_{cm}t} e^{-iH_{rel}t} \quad (10.30)$$

De la expresión anterior observamos que si el estado inicial del sistema compuesto es separable, entonces este permanece siendo de esta forma mientras el sistema evoluciona en el tiempo. Con la descomposición anterior, podemos reescribir a la ecuación de general de Schrödinger para un sistema de dos partículas con un potencial de la forma $V(\mathbf{x})$, como:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = (H_{cm} + H_{rel})\psi \quad (10.31)$$

Por tanto, podemos resolver la ecuación de Schrödinger para dos partículas, por medio de un producto de la forma:

$$\psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}, t) = \Psi(\mathbf{X}, t) \psi_{rel}(\mathbf{x}, t) \quad (10.32)$$

en donde Ψ describe el movimiento libre del centro de masa y ψ el movimiento relativo de las dos partículas,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{X}, t) = H_{cm} \Psi(\mathbf{X}, t) \quad (10.33)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_{rel}(\mathbf{x}, t) = H_{rel} \psi_{rel}(\mathbf{x}, t) \quad (10.34)$$

La linealidad de la ecuación de Schrödinger implica que cualquier combinación lineal arbitraria de soluciones de la forma (10.32) es de nuevo una solución. De esta forma obtenemos una nueva factorización del espacio de Hilbert del sistema binario \mathcal{H} , la cual esta dada por:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{cm} \otimes \mathcal{H}_{rel}$$

en donde \mathcal{H}_{cm} y \mathcal{H}_{rel} son los espacio de Hilbert en donde se encuentran las soluciones de las ecuaciones (10.33) y (10.34), respectivamente.

Es claro que en este caso, las energías de los estados estacionarios del sistema están dadas por los valores propios del Hamiltoniano que describe el movimiento relativo de las partículas.

Capítulo 11

Observables de un sistema binario

11.1. El producto tensorial de operadores

Dado un operador lineal S en un espacio de Hilbert \mathcal{H}^A y otro operador lineal T en el espacio \mathcal{H}^B , podemos definir un operador lineal en el espacio de Hilbert del sistema compuesto. A este nuevo operador lo conoceremos como el producto tensorial de los operadores S y T y lo denotaremos por $S \otimes T$. Siempre que los operadores S y T correspondan a observables de los subsistemas (esto es, que ambos sean auto-adjuntos), el producto tensorial $S \otimes T$, va a ser un observable del sistema compuesto (observable producto). Los valores medibles de $S \otimes T$ son los productos de los valores propios correspondientes a S y T .

Describiremos brevemente como es la construcción del operador $S \otimes T$. Consideramos el caso en el tanto S y T son operadores lineales acotados (por tanto continuos).

Primero, definimos como actúa el operador $S \otimes T$, sobre estados separables:

$$(S \otimes T)\psi^A \otimes \psi^B = S\psi^A \otimes T\psi^B \quad (11.1)$$

y por linealidad, extendemos esta definición a todo el conjunto de superposiciones finitas de estados separables:

$$(S \otimes T) \sum_{j,k}^{m,n} c_{jk} \psi_j^A \otimes \psi_k^B = \sum_{j,k}^{m,n} c_{jk} (S \otimes T) \psi_j^A \otimes \psi_k^B = \sum_{j,k}^{m,n} c_{jk} S\psi_j^A \otimes T\psi_k^B \quad (11.2)$$

El resultado es un operador lineal acotado definido en un dominio denso, que puede ser extendido (por continuidad) a todo el espacio $\mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$. así también, tenemos que:

$$\|S \otimes T\| = \|S\| \|T\| \quad (11.3)$$

Un estado separable $\psi^A \otimes \psi^B$, formado por vectores propios:

$$S\psi^A = s\psi^A, \quad T\psi^B = t\psi^B \quad (11.4)$$

va a ser de nuevo un vector propio del observable producto,

$$(S \otimes T)\psi^A \otimes \psi^B = st\psi^A \otimes \psi^B \quad (11.5)$$

en donde el valor propio es el producto de los valores propios individuales. Esto es una consecuencia inmediata de la definición (11.1). Mas aun, todos los valores propios del producto tensorial de los operadores, se pueden escribir como productos de los valores propios de los factores.

Valores propios del producto tensorial de operadores: Supongamos que S y T son operadores con un espectro discreto de valores propios. Entonces, los valores propios del operador $S \otimes T$ están dados por los productos st , en donde s es un valor propio de S y t es un valor propio de T .

†

Si los observables con los que estamos trabajando, resultan ser además operadores acotados, las siguientes relaciones se cumplen [15]:

$$\alpha(S \otimes T) = (\alpha S) \otimes T = S \otimes (\alpha T), \quad \alpha \in \mathbb{C}. \quad (11.6a)$$

$$(S_1 \otimes T_1)(S_2 \otimes T_2) = S_1 S_2 \otimes T_1 T_2. \quad (11.6b)$$

$$(S \otimes T)^* = S^* \otimes T^*. \quad (11.6c)$$

Para operadores no acotados (como los de posición y momento) se debe de tomar en cuenta las cuestiones del dominio de estos operadores a la hora de hacer su producto tensorial. La ecuación (11.1) solo tiene sentido para $\psi^A \in D(S)$ y $\psi^B \in D(T)$. Usualmente los dominios $D(S)$ y $D(T)$ son conjuntos densos y por tanto el conjunto de combinaciones lineales finitas de estados separables $\psi^A \otimes \psi^B$, es denso en $\mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$. así la ecuación (11.2) nos da la definición de un operador lineal en un conjunto denso del espacio $\mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$. De ser posible, se puede tomar la cerradura de este dominio denso para completar la definición del producto tensorial $S \otimes T$. De esta forma, el producto tensorial de operadores auto adjuntos es de nuevo un operador auto adjunto en el espacio de Hilbert del sistema compuesto. De acuerdo con un teorema general del análisis funcional (mas allá del alcance de este texto) el espectro del producto tensorial de operadores, es el producto de los respectivos espectros de los factores.

Existen por supuesto, observables del sistema compuesto que no pueden ser expresados como el producto tensorial de observables de los subsistemas individuales. Como ejemplo, tenemos a la energía potencial $V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$, de la ecuación (10.25), la cual describe la interacción en un sistema de dos partículas, excepto si este tuviera la forma, $V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = V_1(\mathbf{x}_1) V_2(\mathbf{x}_2)$.

Otro ejemplo interesante es el de la **suma de Kronecker**, la cual combina dos operadores S y T de los subsistemas respectivamente y los combina en el operador $S \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes T$. En particular, generador del producto tensorial grupos unitarios es la suma de Kronecker de los generadores:

$$e^{-itS} \otimes e^{-itT} = e^{-it(S \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes T)} \quad (11.7)$$

Esto se puede ver de la siguiente forma. Si $U(t)$ es un producto tensorial de grupos unitarios,

$$U(t) = V(t) \otimes W(t) = e^{-itS} \otimes e^{-itT}$$

entonces el generador de $U(t)$ se obtiene como es usual, derivando a este operador en $t = 0$. La regla de la derivada de un producto también es valida para los productos tensoriales:

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t) = \left(\frac{\partial}{\partial t} V(t) \right) \otimes W(t) + V(t) \otimes \left(\frac{\partial}{\partial t} W(t) \right)$$

y encontramos que:

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t) \Big|_{t=0} = S \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes T$$

Manipulaciones locales

En un sistema compuesto AB , algunas veces uno puede estar interesado en medir un observable que esta definido solamente para uno de los subsistemas. Una medición que se realiza en el subsistema A , sin perturbar al subsistema B , es llamada una **medición local** del subsistema A . Esto solamente es posible si los dos subsistemas pueden ser aislados uno del otro, lo cual es ciertamente mas fácil, como es el caso algunas veces, si estos se encuentran separados espacialmente desde un inicio.

En el espacio de Hilbert de un sistema compuesto $(\mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B)$, un observable S del subsistema A es representado por el operador,

$$S \otimes \mathbf{1} \quad (11.8)$$

El donde $\mathbf{1}$, denota al operador identidad del espacio de Hilbert \mathcal{H}^B del subsistema B . Un operador de la forma (11.8) solo actúa de una forma diferente al operador identidad, sobre los estados del subsistema A (a menos claro que $S = \mathbf{1}$), tiene los mismos valores propios que el operador S y es auto adjunto siempre que S lo sea. Por supuesto, lo mismo se aplica a los observables de la forma $\mathbf{1} \otimes T$, del subsistema B .

Observables de los subsistemas: Los observables del tipo $S \otimes \mathbf{1}$ o $\mathbf{1} \otimes T$, son llamados **observables locales** u **observables de los subsistemas**. Observables locales, pertenecientes a diferentes subsistemas, conmutan entre si:

$$[S \otimes \mathbf{1}, \mathbf{1} \otimes T] = 0$$

Si S es un operador auto adjunto, el grupo unitario generado por $S \otimes \mathbf{1}$, esta dado por:

$$e^{-it(S \otimes \mathbf{1})} = e^{-itS} \otimes \mathbf{1} \quad (11.9)$$

y similarmente para el operador auto adjunto $\mathbf{1} \otimes T$.

†

Una transformación unitaria de la forma $V \otimes \mathbf{1}$, en donde V es un operador unitario en el espacio de Hilbert del subsistema A , es conocida como una **transformación del subsistema**. Una transformación de este tipo puede ser realizada aplicando el operador V al subsistema A (esto es, a los vectores del espacio de Hilbert \mathcal{H}^A), sin hacerle nada a los vectores del subsistema B . Entonces, el producto tensorial de transformaciones unitarias puede ser escrito como el producto de transformaciones de los subsistemas,

$$V \otimes W = (V \otimes \mathbf{1})(\mathbf{1} \otimes W) \quad (11.10)$$

Las transformaciones unitarias de este tipo son conocidas como **transformaciones unitarias locales**. Físicamente, podemos realizar una transformación unitaria local, cuando los subsistemas se encuentran aislados uno del otro.

Recordemos que una *propiedad* P de un subsistema A , es descrita por un **operador de proyección ortogonal**. Un operador de este tipo es un operador auto adjunto acotado P , con la propiedad $P^2 = P$. Sus únicos valores propios son 0 y 1. El rango del operador P , es el conjunto de estados del subsistema A , que tienen la propiedad que corresponde a este operador ($\text{Ran } P = \text{espacio propio del valor propio } 1$). Resulta ser que en el sistema compuesto $P \otimes \mathbf{1}$ es un operador de proyección ortogonal, siempre que P lo sea. Por tanto, podemos concluir que las propiedades de un subsistema, también son propiedades del sistema compuesto. El observable $P \otimes \mathbf{1}$ mide si el subsistema A tiene la propiedad A , sin considerar al subsistema B .

11.2. El operador de densidad

Si un sistema binario se encuentra en el estado separable $\psi^A \otimes \psi^B$, entonces podemos decir que el subsistema A se esta en el estado ψ^A . Pero, ¿Como caracterizamos al subsistema, si el sistema compuesto se encuentra en un estado entrelazado?

¿Que significa el entrelazamiento para los subsistemas?

Consideremos como ejemplo a un sistema cuántico formado por dos qubits. Un qubit es un sistema cuántico al cual le corresponde un espacio de Hilbert de dos dimensiones, es decir, un sistema para el cual solo existen dos estados posibles ψ_+ o ψ_- , los cuales son orto normales entre ellos.

Supongamos que este sistema de qubits se encuentra en el estado:

$$\psi_e^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ \otimes \psi_+ + \psi_- \otimes \psi_-) \quad (11.11)$$

¿Que es lo que sabemos acerca del estado de los qubits A y B ?, ¿Que información acerca de los qbits individuales esta contenida en el estado entrelazado del sistema compuesto?

El estado ψ_e^+ es una superposición de dos estados producto orto normales, en el cual la probabilidad de encontrar a los dos qubits en el estado ψ_+ es $1/2$, la misma que la de encontrar a ambos en el estado ψ_- . Por tanto, el qubit A se encuentra en el estado ψ_+ o ψ_- con igual probabilidad $1/2$. Es importante entender que el estado del qubit A no es una superposición de los estados ψ_+ y ψ_- , si no que mas bien es una mezcla estadística de estos.

Mezcla estadística: Una **mezcla estadística** de dos estados cuánticos ψ_1 y ψ_2 , es un ensamble de sistemas en donde cada sistema individual es preparado con probabilidad p en el estado ψ_1 y con probabilidad $1 - p$ en el estado ψ_2 . Aquí, los estados ψ_1 y ψ_2 no necesitan ser ortogonales.

†

Valores esperados de observables de los subsistemas

Con el objetivo de desarrollar una teoría que pueda describir los estados de un subsistema, deseamos saber como extraer información de estos directamente del estado de un sistema compuesto. Con este objetivo, consideramos al observable $S \otimes \mathbf{1}$ del subsistema A . Por simplicidad, supongamos que S es un operador acotado del espacio de Hilbert de A . Ahora, calculemos el valor esperado de este observable. Para esto necesitamos a las bases orto normales $\{\psi_i^A\}$ de \mathcal{H}^A y ψ_j^B de \mathcal{H}^B . Como sabemos, los productos $\psi_i^A \otimes \psi_j^B$ forman una base ortonormal del espacio $\mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$. Por tanto, el estado ψ del sistema compuesto, puede ser escrito como una combinación lineal de estos estados producto:

$$\psi = \sum_{i,j} c_{ij} \psi_i^A \otimes \psi_j^B$$

en donde suponemos que, $\|\psi\|^2 = \sum_{i,j} |c_{ij}|^2 = 1$. Entonces, el valor esperado de $S \otimes \mathbf{1}$ en el estado ψ esta dado por el siguiente calculo:

$$\begin{aligned} (\psi, (S \otimes \mathbf{1})\psi) &= \left(\sum_{i,j} c_{ij} \psi_i^A \otimes \psi_j^B, \sum_{k,l} c_{kl} S\psi_k^A \otimes \psi_l^B \right) \\ &= \sum_{i,j,k,l} \overline{c_{ij}} c_{kl} (\psi_i^A \otimes \psi_j^B, S\psi_k^A \otimes \psi_l^B) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i,j,k,l} \overline{c_{ij}} c_{kl} (\psi_i^A, S\psi_k^A) (\psi_j^B, \psi_l^B) \\
&= \sum_{i,j,k,l} \overline{c_{ij}} c_{kl} (\psi_i^A, S\psi_k^A) \delta_{jl}
\end{aligned}$$

Luego, usando la definición de la delta de Kronecker δ_{jl} , tenemos que:

$$(\psi, (S \otimes \mathbf{1})\psi) = \sum_{i,k,l} \overline{c_{il}} c_{kl} (\psi_i^A, S\psi_k^A) \quad (11.12)$$

Esta expresión del valor esperado involucra a los “elementos de matriz” de S entre muchos estados diferentes del subsistema. Usualmente el valor esperado de un observable S en el estado ψ es solamente $(\psi, S\psi)$, pero la ecuación (11.12) muestra que el valor esperado del observable de un subsistema es algo mucho más complicado. Esto sugiere que para un estado dado del sistema compuesto, el estado del subsistema no puede ser descrito solo por un simple vector del espacio de Hilbert de este subsistema. A continuación, vamos a verificar que el resultado (11.12) se puede escribir de otra forma. Para esto necesitamos definir la traza de un operador.

Operadores de traza finita

Definición 11.1. *Supongamos que para un operador lineal S , la serie*

$$\text{Tr}(S) = \sum_j (\psi_j, S\psi_j) \quad (11.13)$$

*converge y tiene el mismo valor para toda base ortonormal $\{\psi_j\}$ del espacio de Hilbert en donde esta definido. Entonces, al número $\text{Tr}(S)$ lo conoceremos como la **traza del operador S** y diremos que este operador es de **traza finita**.*

En la literatura más importante del análisis funcional a los operadores de traza finita se les conoce también como **operadores nucleares** y estos forman la clase de operadores S_1 la cual es un subconjunto de la familia de operadores compactos definidos en un cierto espacio de Banach [10].

El valor de la serie (11.13) es automáticamente independiente de la selección de la base ortonormal, siempre que el espacio de Hilbert sea de dimensión finita o siempre que el operador S sea un **operador no negativo** (esto es, un operador para el cual $(\psi, S\psi) \geq 0, \forall \psi$). Sin embargo, esto no es cierto en el caso general por lo que necesitamos la suposición de la definición anterior. Mas aun, notamos que todo operador de traza finita es acotado, pero que no todo operador acotado es de traza finita. Para un operador de traza finita no negativo tenemos en particular que, $\|S\| \leq \text{Tr}(S)$.

En la siguiente definición introducimos una importante sub clase de los operadores de traza finita.

Definición 11.2. *Diremos que un operador lineal acotado (por tanto definido en todo el espacio) ρ , es un **operador de densidad** si posee las siguientes propiedades:*

1. ρ es no negativo: $(\psi, \rho\psi) \geq 0, \forall \psi \in \mathcal{H}$.
2. ρ es de traza finita y $\text{Tr}(\rho) = 1$.

Enunciamos el siguiente resultado matemático como la principal caracterización de los operadores de traza finita, la demostración de este hecho es propia del análisis funcional para la cual se necesita de una teoría matemática más elaborada la cual puede ser encontrada en [10].

Forma canónica de un operador de traza finita: Un operador lineal auto adjunto S , en un espacio de Hilbert \mathcal{H} es de traza finita, si y solo si, existe una base ortonormal $\{\psi_j\}$ de \mathcal{H} , para la cual:

$$S = \sum_j \lambda_j \psi_j(\psi_j, \cdot) \quad (11.14)$$

con números reales λ_j , tales que $\sum_j |\lambda_j| < \infty$. De esta forma, la traza de S esta dada por:

$$\text{Tr}(S) = \sum_j \lambda_j \quad (11.15)$$

Un operador con la forma (11.14) tiene como valores propios a los valores λ_j y como correspondientes vectores propios a los elementos de la base ψ_j . Cada valor propio no nulo tiene a lo mas un grado finito de degeneración.

†

En este punto debemos hacer notar que un operador de traza finita S es un operador compacto, ya que claramente este es el limite uniforme de una sucesión de operadores de rango finito, esto es:

$$\|S_k - S\| \rightarrow 0$$

cuando $k \rightarrow \infty$, en donde $S_k = \sum_{j=1}^k \lambda_j \psi_j(\psi_j, \cdot)$.

Si ρ es un operador de densidad, entonces es fácil ver de la definición 11.2, que sus valores propios satisfacen:

$$\lambda_j \geq 0, \quad \sum_j \lambda_j = 1 \quad (11.16)$$

Operador de densidad de un subsistema

Ahora, retomaremos la tarea de describir la expresión (11.12). Dado un estado normalizado de un sistema cuántico compuesto:

$$\psi = \sum_{i,j} c_{ij} \psi_i^A \otimes \psi_j^B \quad (11.17)$$

(en donde $\{\psi_i^A\}$ y $\{\psi_j^B\}$, son bases orto normales), definimos al operador:

$$\rho^A = \sum_{i,k,l} \bar{c}_{il} c_{kl} \psi_k^A(\psi_i^A, \cdot) \quad (11.18)$$

Este operador tiene las siguientes propiedades:

1. ρ^A es acotado, auto adjunto y no negativo.
2. ρ^A es de traza finita, con $\text{Tr}(\rho^A) = 1$.

Por tanto ρ^A es un operador de densidad. Este solo tiene valores propios no negativos cuya suma es uno. Si S es un operador acotado, entonces el operador $S\rho^A$ es de traza finita (este es un resultado del análisis funcional mas allá del alcance de este texto). Calculemos la traza de este operador:

$$\text{Tr}(S\rho^A) = \sum_j (\psi_j^A, S\rho^A\psi_j^A)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{j,i,k,l} \overline{c_{il}} c_{kl} (\psi_j^A, S\psi_k^A) (\psi_i^A, \psi_j^A) \\
&= \sum_{j,i,k,l} \overline{c_{il}} c_{kl} (\psi_j^A, S\psi_k^A) \delta_{ij} \\
&= \sum_{i,k,l} \overline{c_{il}} c_{kl} (\psi_i^A, S\psi_k^A) \tag{11.19}
\end{aligned}$$

Si comparamos este resultado con la ecuación (11.12), vemos que $\text{Tr} S \rho^A$, es solo otra forma de expresar el valor esperado del observable $S \otimes \mathbf{1}$ en el estado ψ .

Valores esperados para un subsistema: Sea ψ un estado normalizado del sistema binario descrito por el espacio de Hilbert $\mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$. Sean c_{ij} los coeficientes de la expansión de ψ respecto a una base ortonormal $\{\psi_i^A \otimes \psi_j^B\}$. Entonces el operador:

$$\rho^A = \sum_{i,k,l} \overline{c_{il}} c_{kl} \psi_k^A (\psi_i^A, \cdot) \tag{11.20}$$

es un operador de densidad. Si S es un operador acotado definido en \mathcal{H}^A , entonces:

$$\langle S \otimes \mathbf{1} \rangle_\psi = (\psi, (S \otimes \mathbf{1})\psi) = \text{Tr}(S \rho^A) \tag{11.21}$$

Un resultado similar es cierto para los observables del sistema B .

Capítulo 12

Estados puros y entrelazados

Todo lo que puede ser conocido de un sistema cuántico está contenido en los valores esperados de los observables del sistema. Para un subsistema podemos calcular estos valores esperados a través del operador de densidad según la ecuación (11.21). Por tanto, el operador de densidad describe el estado del subsistema.

El estado de un subsistema: Si un estado binario se encuentra en el estado ψ , entonces el estado del subsistema A está caracterizado por el operador de densidad ρ^A definido en (11.20). El estado del subsistema B está descrito por un operador similar ρ^B

†

Al operador de densidad ρ^A , también lo conoceremos como la **matriz de densidad** del subsistema A . Lo mismo haremos para el operador ρ^B del subsistema B .

Anteriormente en este texto caracterizamos a los estados de un sistema como subespacios de una dimensión de un espacio de Hilbert (ec. (6.1)). Por conveniencia utilizamos al vector normalizado ψ del subespacio $[\psi] = \{c\psi \mid c \in \mathbb{C}\}$, para representar al estado del sistema. De forma equivalente podemos describir a $[\psi]$ mediante el operador $\rho = \psi(\psi, \cdot)$, el cual es el único operador de proyección ortogonal con rango $[\psi]$. Mas aun, es fácil ver que ρ es un operador de densidad. De esta forma los operadores de densidad son una generalización de nuestro concepto anterior de estado.

Estados puros y entrelazados En general, el estado de un sistema cuántico es descrito por un operador de densidad ρ . A un operador de proyección de una dimensión:

$$\rho = \psi(\psi, \cdot), \quad \text{con } \|\psi\| = 1 \quad (12.1)$$

lo conoceremos como un **estado puro** y es representado usualmente por el vector ρ . De otra forma ρ es conocido como un **estado entrelazado**.

†

Supongamos que un sistema binario se encuentra en el estado separable $\psi = \psi^A \otimes \psi^B$. también supongamos que ψ^A pertenece a una cierta base ortonormal. Usando esta base en la expresión (11.20), vemos inmediatamente que la matriz de densidad del subsistema describe un estado puro:

$$\rho^A = \psi^A(\psi^A, \cdot) \quad (12.2)$$

De la misma forma, el valor esperado del observable $S \otimes \mathbf{1}$ se reduce a la expresión:

$$\text{Tr}(S\rho^A) = (\rho^A, S\rho^A) \quad (12.3)$$

Siempre que un sistema compuesto se encuentre en un estado separable, entonces los subsistemas que lo componen se encuentran en estados puros.

12.1. Forma canónica del operador de densidad

Para un operador de densidad dado ρ , podemos encontrar una base ortonormal $\{\psi_j\}$, tal que ρ se puede escribir en su forma canónica (ec. (11.14)):

$$\rho = \sum_j p_j \psi_j (\psi_j, \cdot) \quad (12.4)$$

cuando ρ se escribe en la forma anterior, diremos que este es un operador diagonal respecto a la base $\{\psi_j\}$. Aquí los números p_j son los valores propios de ρ y los vectores ψ_j son sus correspondientes vectores propios. Ya que ρ es no negativo con $\text{Tr}(\rho) = 1$, los vectores propios satisfacen las condiciones:

$$p_j \geq 0 \quad (\forall j), \quad \sum_j p_j = 1 \quad (12.5)$$

El operador de proyección $P_k = \psi_k (\psi_k, \cdot)$, es un observable que describe la propiedad de “estar en el estado ψ_k ”. La probabilidad de que un sistema descrito por ρ , se encuentre en el estado ψ_k esta dada, como es usual, por el valor esperado de P_k , esto es:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(P_k \rho) &= \sum_l (\psi_l, P_k \rho \psi_l) \\ &= \sum_{l,j} p_j (\psi_l, \psi_k) (\psi_k, \psi_j) (\psi_j, \psi_l) = p_k \end{aligned} \quad (12.6)$$

por tanto, el valor propio p_k de ρ , es la probabilidad de que un sistema en el estado entrelazado ρ se encuentre en el estado puro ψ_k (por estado puro nos referimos a que el sistema ya no esta en una mezcla estadística de estados, ya que ahora conocemos un estado en concreto). Un **estado puro** es un elemento del espacio de Hilbert del sistema, el cual es capaz de describir el estado en el que este sistema se encuentra. Las condiciones (12.5) muestran que la interpretación de los números p_j como probabilidades, es consistente.

Significado del operador de densidad: Un estado entrelazado ρ de un sistema físico, es un ensamble estadístico de estados puros $\{\psi_1, \psi_2, \dots\}$, los cuales forman un conjunto ortonormal, en donde cada estado ψ_j ocurre con una probabilidad p_j . Las probabilidades p_j son los valores propios del operador de densidad ρ y los estados puros ψ_j son sus correspondientes vectores propios.

†

Debemos mencionar que en el caso en el que uno de los valores propios de ρ sea degenerado, entonces la forma canónica de ρ (12.4), no es única.

12.2. Forma normal del vector de estado

Regresemos a nuestro estudio de los sistemas cuánticos compuestos. Usando la forma canónica (12.4) del operador de densidad ρ^A , podemos obtener una forma normal para el vector de estado de un sistema compuesto. Con esta nueva forma normal es fácil determinar cuando el estado de un

sistema compuesto es entrelazado o puro y si el vector ψ esta determinado de forma única por los estados de los subsistemas o no.

Escribamos al estado ψ del sistema compuesto como una combinación lineal de estados producto. Escogemos en \mathcal{H}^A una base ortonormal $\{\phi_j^A\}$, respecto a la cual el operador de densidad ρ^A es diagonal. Supongamos que $\{\psi_j^B\}$ es una base ortonormal arbitraria del espacio \mathcal{H}^B . Entonces,

$$\psi = \sum_{ij} c_{ij} \phi_i^A \otimes \psi_j^B = \sum_i \phi_i^A \otimes \left(\sum_j c_{ij} \psi_j^B \right) = \sum_i \phi_i^A \otimes \chi_i^B \quad (12.7)$$

en donde,

$$\chi_i^B = \sum_j c_{ij} \psi_j^B \quad (12.8)$$

Ya que ρ^A es diagonal en la base $\{\phi_j^A\}$, tenemos por la ecuación (11.20), que:

$$\rho^A = \sum_j p_j \phi_j^A (\phi_j^A, \cdot) = \sum_{j,k} \sum_l \bar{c}_{jl} c_{kl} \phi_k^A (\phi_j^A, \cdot) \quad (12.9)$$

y por tanto:

$$\sum_l \bar{c}_{jl} c_{kl} = p_j \delta_{jk} \quad (12.10)$$

Esta expresión no es mas que el producto escalar de los vectores χ_j^B y χ_k^B , ya que:

$$(\chi_j^B, \chi_k^B) = \sum_{lr} \bar{c}_{jl} c_{kr} (\psi_l^B, \psi_r^B) = \sum_{lr} \bar{c}_{jl} c_{kr} \delta_{lr} = \sum_l \bar{c}_{jl} c_{kl}$$

Por tanto:

$$(\chi_j^B, \chi_k^B) = p_j \delta_{jk}$$

así, los vectores $\{\chi_j^B\}$ forman un conjunto ortogonal en \mathcal{H}^B . Después de normalizar a estos vectores, obtenemos al conjunto ortonormal formado por los vectores:

$$\phi_j^B = \frac{1}{\sqrt{p_j}} \chi_j^B \quad (12.11)$$

Insertando esta expresión en la ecuación (12.7), obtenemos la forma normal de ψ :

$$\psi = \sum_i \sqrt{p_i} \phi_i^A \otimes \phi_i^B \quad (12.12)$$

De aquí podemos concluir lo siguiente: ψ es separable, si y solo si, solamente uno de los sumandos es diferente de cero, de otra forma es un estado entrelazado. En el caso separable tenemos $p_k = 1$, precisamente para un solo índice k y $\rho^A = \phi_k^A (\phi_k^A, \cdot)$, es un estado puro. Como consecuencia tenemos el siguiente resultado:

Estados puros y entrelazados: Un subsistema esta en un estado puro (es decir, no es descrito por un ensamble estadístico de estados), si y solo si, el estado del sistema compuesto es separable. El subsistema se encuentra en un ensamble estadístico de estados, si y solo si, el estado del sistema compuesto es entrelazado.

Si el sistema compuesto es descrito por (12.12), entonces el estado del sistema B esta dado por:

$$\rho^B = \sum_i p_i \phi_i^B (\phi_i^B, \cdot) \quad (12.13)$$

Por tanto, para los dos sistemas A y B , los valores propios no nulos de los operadores de densidad correspondientes son los mismos. A cada vector propio con valor propio no nulo del operador ρ^A , le corresponde un vector propio del operador ρ^B con el mismo valor propio. Solo el grado de degeneración del valor propio cero puede ser diferente entre los sistemas, ya que las dimensiones de los espacios de Hilbert \mathcal{H}^A y \mathcal{H}^B pueden ser diferentes. Mas aun, los sistemas A y B tienen el mismo tipo de estados, es decir, ambos son puros o ambos son entrelazados.

Forma normal del vector de estado: Para un estado dado $\psi \in \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$ de un sistema compuesto, podemos encontrar bases orto normales $\{\phi_j^A\} \subset \mathcal{H}^A$ y $\{\phi_j^B\} \subset \mathcal{H}^B$, tales que:

$$\psi = \sum_i \sqrt{p_i} \phi_i^A \otimes \phi_i^B, \quad p_i \geq 0, \quad \sum_i p_i = 1 \quad (12.14)$$

A la expresión (12.14) se le conoce como la **representación de Gram-Schmidt** de ψ .

Si el estado del sistema compuesto esta dado por (12.14), entonces los estados de los subsistemas están descritos por los operadores de densidad:

$$\rho^A = \sum_i p_i \phi_i^A (\phi_i^A, \cdot); \quad \rho^B = \sum_i p_i \phi_i^B (\phi_i^B, \cdot) \quad (12.15)$$

Por tanto, ρ^A y ρ^B tienen los mismos valores propios no nulos. ρ^A es un estado puro, si y solo si, ρ^B es también un estado puro.

†

12.3. Pureza del estado de un sistema binario

Tomemos al estado $\psi \in \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$ de un sistema binario, escrito en su forma normal respecto a las bases orto normales $\{\phi_i^A\} \subset \mathcal{H}^A$ y $\{\phi_i^B\} \subset \mathcal{H}^B$,

$$\psi = \sum_i \sqrt{p_i} \phi_i^A \otimes \phi_i^B$$

en donde $p_i \geq 0$ y $\sum_i p_i = 1$. El operador de densidad del sistema A esta dado por:

$$\rho_A = \sum_i p_i \phi_i^A (\phi_i^A, \cdot)$$

Ahora para $\phi_k^A \in \{\phi_i^A\} \subset \mathcal{H}^A$, tenemos que:

$$\rho_A(\phi_k^A) = \sum_i p_i \phi_i^A (\phi_i^A, \phi_k^A) = \sum_i p_i \phi_i^A \delta_{ik} = p_k \phi_k^A \quad (12.16)$$

Luego, ya que ρ_A es lineal:

$$\rho_A^2(\phi_k^A) = \rho_A \circ \rho_A(\phi_k^A) = p_k^2 \phi_k^A \quad (12.17)$$

De esta forma, podemos ahora calcular la traza $\text{Tr}(\rho_A^2)$, respecto a la base ortonormal $\{\phi_i^A\} \subset \mathcal{H}^A$:

$$\text{Tr}(\rho_A^2) = \sum_j (\phi_j^A, \rho_A^2 \phi_j^A) = \sum_j (\phi_j^A, p_j^2 \phi_j^A) = \sum_j p_j^2 (\phi_j^A, \phi_j^A) = \sum_j p_j^2 \quad (12.18)$$

De aquí podemos separar dos casos, uno cuando ρ_A es un estado puro ($p_j \neq 0$, solo para $j = 1$) y otro cuando ρ_A es un sistema entrelazado ($p_j \neq 0$, para mas de un índice j).

Examinemos primero el caso en el que ρ_A representa a un sistema entrelazado. Ya que ψ esta escrito en su forma normal, tenemos por las condiciones (12.14), que para todo índice j , $0 < p_j < 1$; esto implica que, $0 < p_j^2 < p_j < 1$, luego tenemos que:

$$0 < \text{Tr}(\rho_A^2) = \sum_j p_j^2 < \sum_j p_j = 1 \quad (12.19)$$

Por tanto, podemos concluir que para un sistema en un estado entrelazado:

$$\text{Tr}(\rho_A^2) < 1 \quad (12.20)$$

En caso de que ρ_A represente a un sistema en un estado puro, tenemos que $\rho_j \neq 0$, solo para un índice j y mas aun, para este índice, $p_j = 1$. Luego es claro que:

$$\text{Tr}(\rho_A^2) = 1 \quad (12.21)$$

Por (12.15) tenemos que, $\text{Tr}(\rho_A^2) = \text{Tr}(\rho_B^2)$ y por tanto esta cantidad solo depende del estado del sistema binario ψ . A esta cantidad la definimos como la *pureza* del estado ψ .

Pureza del estado de un sistema binario: La pureza del estado $\psi \in \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$ de un sistema binario, esta dada por:

$$P(\psi) = \text{Tr}(\rho_A^2) = \text{Tr}(\rho_B^2) \quad (12.22)$$

en donde, $0 \leq P(\psi) \leq 1$. $P(\psi) < 1$, si y solo si, ψ es un estado entrelazado y $P(\psi) = 1$, si y solo si, ψ es un estado separable. De esta forma, la pureza $P(\psi)$ es una medida del entrelazamiento que existe en un sistema binario cuando este se encuentra en el estado ψ .

†

En caso de que tengamos $\mathcal{H}^A = \mathcal{H}^B = L^2(\mathbb{R}^n)$, existe una forma mas directa de calcular la pureza del estado ψ , sin tener que buscar los vectores propios del operador de densidad de alguno de los subsistemas. Como en lo anterior, supongamos que $\{\phi_i\} \subset L^2(\mathbb{R}^n)$ es una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R}^n)$, respecto a la cual el estado del sistema binario $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) \otimes L^2(\mathbb{R}^n)$ se puede escribir en su forma normal,

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_i \sqrt{p_i} \phi_i^A(\mathbf{x}_1) \otimes \phi_i^B(\mathbf{x}_2) = \sum_i \sqrt{p_i} \phi_i^A(\mathbf{x}_1) \phi_i^B(\mathbf{x}_2)$$

en donde $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^n$, ($i = 1, 2$). Ahora calculemos la siguiente integral:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^{4n}} \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \psi(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) \overline{\psi(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2)} \overline{\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)} d\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 \mathbf{x}'_1 \mathbf{x}'_2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^{4n}} \sum_i \sqrt{p_i} \phi_i(\mathbf{x}_1) \phi_i(\mathbf{x}_2) \cdot \sum_j \sqrt{p_j} \phi_j(\mathbf{x}'_1) \phi_j(\mathbf{x}'_2) \cdot \sum_k \sqrt{p_k} \overline{\phi_k(\mathbf{x}'_1)} \overline{\phi_k(\mathbf{x}_2)} \cdot \sum_l \sqrt{p_l} \overline{\phi_l(\mathbf{x}_1)} \overline{\phi_l(\mathbf{x}'_2)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i,j,k,l} \int_{\mathbb{R}^{4n}} \sqrt{p_i p_j p_k p_l} \left(\phi_i(\mathbf{x}_1) \cdot \overline{\phi_l(\mathbf{x}_1)} \right) \left(\phi_i(\mathbf{x}_2) \cdot \overline{\phi_k(\mathbf{x}_2)} \right) \left(\phi_j(\mathbf{x}'_1) \cdot \overline{\phi_k(\mathbf{x}'_1)} \right) \left(\phi_j(\mathbf{x}'_2) \cdot \overline{\phi_l(\mathbf{x}'_2)} \right) \\
&= \sum_{i,j,k,l} \sqrt{p_i p_j p_k p_l} \delta_{i,l} \delta_{i,k} \delta_{j,k} \delta_{j,l} = \sum_i \sqrt{p_i^4} = \sum_i p_i^2
\end{aligned}$$

Por tanto, tenemos que:

$$\int_{\mathbb{R}^{4n}} \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \psi(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) \overline{\psi(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2)} \overline{\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_2)} d\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 \mathbf{x}'_1 \mathbf{x}'_2 = \sum_i p_i^2 = P(\psi) \quad (12.23)$$

Mas aun, observamos que la integral de la expresión anterior, se puede ver como el producto escalar de dos funciones de $L^2(\mathbb{R}^{4n})$ (a saber, las funciones $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \psi(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) \in L^2(\mathbb{R}^{4n})$ y $\psi(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2) \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_2) \in L^2(\mathbb{R}^{4n})$), de esta forma por el teorema de Fourier-Plancherel (4.3), tenemos que la expresión para la pureza (12.23) también es valida para la transformada de Fourier de ψ , $\mathcal{F}(\psi) = \hat{\psi}$ (ec. (4.16)), lo cual es claramente útil cuando estamos trabajando en el espacio de momentos. así, tenemos que la pureza para una función de onda $\hat{\psi} \in L^2(\mathbb{R}^n) \otimes L^2(\mathbb{R}^n)$ en el espacio de momentos, esta dada por:

$$\int_{\mathbb{R}^{4n}} \hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \hat{\psi}(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) \overline{\hat{\psi}(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2)} \overline{\hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2)} d\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}'_1 \mathbf{p}'_2 = \sum_i p_i^2 = P(\hat{\psi}) = P(\psi) \quad (12.24)$$

Es en este punto en donde debemos hacer notar que toda la teoría de sistemas compuestos que hemos desarrollado ha sido en espacios de Hilbert en general, no importando si las funciones de onda se encuentran en el espacio de posiciones o de momentos; por tanto esta es igualmente valida en ambas representaciones. En caso de que tengamos $\mathcal{H}^A = \mathcal{H}^B = L^2(\mathbb{R}^n)$, la linealidad y la propiedad unitaria de la transformada de Fourier (ec. (4.16)), nos aseguran que un estado es separable en el espacio de posiciones, si y solo si, es separable en el espacio de momentos; así también que un estado es entrelazado en el espacio de posiciones, si y solo si, es entrelazado en el espacio de momentos. Estos dos últimos hechos también se pueden concluir fácilmente de las ecuaciones (12.23) y (12.24).

Capítulo 13

Teoría de dispersión

Estamos familiarizados con la teoría de dispersión clásica, en la cual se estudian los procesos de dispersión entre varias partículas, partículas y blancos, entre ondas y obstáculos materiales, e.c.t.

En nuestro caso, estamos interesados en la parte de esta teoría que estudia la dispersión entre partículas, a través de la interacción que existe entre ellas. Sobre todo nuestro caso de estudio es aquel cuando dispersión o colisión entre estas partículas se da a bajas energías, en procesos de dispersión elásticos. En un proceso de dispersión elástico, la energía y el momento total del sistema se conservan durante todo este proceso, mas aun, las partículas no sufren ningún cambio en su estructura interna. En general, la teoría de dispersión ha demostrado ser de vital importancia en la física, ya que por ejemplo casi todo lo que sabemos acerca de física nuclear y atómica actualmente a podido ser descubierto a través de experimentos de dispersión (El descubrimiento del núcleo atómico por parte de Rutherford, el descubrimiento de las partículas subatómicas, e.c.t.), es por esto que vale la pena abordar este desarrollo teórico mas allá del punto de vista de la física clásica y desarrollarlo según el formalismo de la mecánica cuántica. Sin embargo, como hemos visto anteriormente, en la teoría cuántica no tiene ningún sentido el hablar de partículas bien localizadas, tal como sucede en el desarrollo de la teoría de dispersión al surgir directamente de conceptos de la física clásica. Es por esto que primero debemos examinar los aspectos físicos mas generales de la teoría de dispersión, para después poder formularla en términos de conceptos propios de la mecánica cuántica.

13.1. Características físicas de los sistemas de dispersión

Como hemos mencionado anteriormente, en nuestro caso particular, estamos interesados en los procesos de dispersión entre partículas a través de la interacción que existe entre estas. Es por esta razón que al referirnos a un sistema dispersor debemos tener en mente a un conjunto de partículas que son capaces de interactuar entre ellas de alguna forma.

En los procesos de dispersión en general, podemos distinguir tres etapas de la evolución temporal de los sistemas que pasan por este proceso. En la primera etapa, el estado del sistema esta preparado en el *pasado remoto*. En esta etapa suponemos que las partículas del sistema están tan alejadas unas de otras, que la interacción entre estas es despreciable y por tanto no tiene ningún efecto en la evolución temporal de ninguna de estas. Esta suposición siempre es hecha en la interpretación de un experimento de dispersión típico, donde las condiciones iniciales son valores de un conjunto de cantidades físicas, las cuales caracterizan a un conjunto de partículas libres (por ejemplo, momentos, spin y masas).

Durante la segunda etapa, las partículas interactúan entre ellas y la evolución del sistema es go-

bernada por una ecuación de movimiento para la cual el término de interacción ya no es despreciable y juega un papel crucial en el comportamiento del sistema. Es de hecho este término de interacción el cual produce el fenómeno de dispersión de las partículas.

En la tercera etapa nos encontramos con la misma situación que en la primera. Aquí suponemos que después de que ha ocurrido el proceso de dispersión, las partículas se separan tanto unas de otras, que de nuevo el factor de interacción entre estas es despreciable y por tanto no tiene ningún efecto en la evolución del estado del sistema completo. En el futuro distante, un detector puede observar este nuevo estado de las partículas, el cual ha sido creado por el proceso de dispersión y medir todas las propiedades que sean de interés para el experimento.

El requisito de que los estados que describen a los eventos de dispersión, deban ser caracterizables a tiempos muy grandes, tanto en el pasado remoto como en el futuro distante, por estados propios de los sistemas formados por partículas libres, es conocida como la **condición asintótica**. Esta condición se puede expresar en términos del formalismo de la mecánica cuántica de forma matemática, ya que conocemos la descripción de la evolución temporal de sistemas cuánticos (en particular de los sistemas formados por partículas libres). Además conocemos la topología de los espacios de Hilbert, a los cuales pertenecen las funciones de onda que describen a los sistemas cuánticos, haciéndonos capaces de describir de esta manera las diferencias entre los estados del sistema, tanto entre la primera y la segunda etapa del proceso de dispersión, como entre la segunda y tercera etapa de este proceso.

Capítulo 14

Teoría cuántica de la dispersión

Es este capítulo discutiremos la *teoría cuántica de la dispersión dependiente del tiempo*. Comenzaremos con la formulación matemática de la condición asintótica, introducida en el capítulo anterior, pero esta vez en el formalismo de la mecánica cuántica, para procesos de dispersión elásticos, en donde los constituyentes del sistema no sufren ningún cambio en su estructura física durante el proceso de dispersión. Así también, deduciremos algunas consecuencias notables de esta condición, en particular algunas del operador de dispersión.

14.1. La condición asintótica

Consideremos el caso posible más simple, a saber, aquel en el que un sistema cuyos constituyentes van a pasar por un proceso de dispersión, puede ser descrito completamente por dos grupos unitarios de un parámetro U_t y V_t , los cuales actúan en el espacio de Hilbert \mathcal{H} , formado por todos los estados (puros) del sistema físico bajo estudio. Al grupo unitario U_t , lo interpretaremos como aquel que describe la evolución temporal de los estados del sistema en la ausencia de perturbaciones o de cualquier interacción entre sus constituyentes. Por esta razón al grupo U_t lo conoceremos como el **grupo de evolución no perturbado**. Supondremos que el grupo V_t describe la evolución temporal del sistema, tomando en cuenta las interacciones entre los constituyentes de este y las perturbaciones que puedan existir. Al grupo V_t lo conoceremos como el **grupo total de evolución**.

Desarrollaremos matemáticamente a la condición asintótica en términos de estos grupos unitarios. Por supuesto, estos dos grupos están relacionados entre ellos. La relación entre U_t y V_t usualmente se da en términos de sus respectivos generadores infinitesimales, los cuales por el teorema de Stone, sabemos que son un par de operadores auto adjuntos determinados de forma única por cada grupo. Denotaremos por H_0 y H a los generadores infinitesimales de los grupos unitarios U_t y V_t respectivamente, en donde la relación entre estos está dada por:

$$U_t = e^{-iH_0 t} ; V_t = e^{-iH t} \quad (14.1)$$

A H_0 lo interpretaremos como el operador de energía del sistema en la ausencia de interacciones dentro de este y lo conoceremos como el *Hamiltoniano no perturbado*. Por otro lado, a H lo conoceremos como el *Hamiltoniano total del sistema* (ya que este toma en cuenta las interacciones dentro de este). H es la suma del Hamiltoniano no perturbado H_0 y del Hamiltoniano de interacción V , es decir, $H = H_0 + V$.

Un ejemplo de lo anterior, el cual es conveniente tener en mente durante el siguiente desarrollo, es el de la dispersión causada por un potencial $V(\mathbf{x})$, a una partícula no relativista sin espín en el espacio \mathbb{R}^3 . Este caso en general es conocido como **dispersión potencial**. Aquí el espacio de Hilbert es

$L^2(\mathbb{R}^3)$, el Hamiltoniano no perturbado es el mismo que el de una partícula libre en el espacio \mathbb{R}^3 , $H_0 = -\frac{1}{2}\Delta$, el cual está asociado a la energía cinética de la partícula y $V(\mathbf{x})$ es un operador auto adjunto de multiplicación por un número real con dominio denso en \mathcal{H} . Es muy común que cuando se habla de *dispersión potencial*, se usen los términos **Hamiltoniano libre**, para H_0 y **grupo de evolución libre**, para U_t .

En presencia del factor de interacción, la evolución temporal de un vector de estado dado $\Psi \in \mathcal{H}$, está determinada por el grupo V_t , es decir, al tiempo t el vector de estado correspondiente es $V_t\Psi$. Como mencionamos en el capítulo anterior, en un sistema de dispersión típico, uno busca aproximar la evolución total del sistema a través de la evolución de estados correspondientes a sistemas libres (sistemas sin interacciones entre sus constituyentes) en los límites cuando $t \rightarrow \pm\infty$. Esto se puede hacer fácilmente si suponemos que dado un vector $\Psi \in \mathcal{H}$, existen dos vectores de estado ψ_+ y ψ_- en \mathcal{H} , tales que, $V_t\Psi$ converge en la norma de \mathcal{H} a $U_t\psi_{\pm}$, cuando $t \rightarrow \pm\infty$, respectivamente, es decir:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|V_t\Psi - U_t\psi_-\| = 0 ; \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \|V_t\Psi - U_t\psi_+\| = 0 \quad (14.2)$$

Esto significa que $V_t\Psi$ es prácticamente indistinguible de $U_t\psi_-$, en el pasado remoto y de $U_t\psi_+$, en el futuro distante. La necesidad de la existencia de los vectores ψ_{\pm} que satisfagan la condición (14.2) es, por supuesto, una severa restricción sobre el par de grupos unitarios U_t y V_t que podamos utilizar y corresponde esencialmente a imponer la condición asintótica al sistema de dispersión que se está estudiando. En particular la condición (14.2), implica que para todo operador de proyección P :

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} (\|PV_t\Psi\|^2 - \|PU_t\psi_-\|^2) = 0 ; \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} (\|PV_t\Psi\|^2 - \|PU_t\psi_+\|^2) = 0 \quad (14.3)$$

en el caso de dispersión potencial y tomando como P al operador de multiplicación de $L^2(\mathbb{R}^3)$ por la función característica de una cierta región Δ , observamos que la diferencia entre las mediciones de probabilidad de posición, sobre cualquier subconjunto medible Δ de \mathbb{R}^3 , para los estados $V_t\Psi$ y $U_t\psi_{\pm}$, converge a cero cuando $t \rightarrow \pm$ respectivamente. Por la linealidad y la continuidad de la transformada de Fourier, lo mismo sucede para las mediciones de la probabilidad del momento.

Necesitamos aun especificar algunos puntos clave sobre la descripción anterior que acabamos de discutir sobre la condición asintótica, sobre todo debemos de especificar para que conjunto de vectores $\Psi \in \mathcal{H}$ (de ahora en adelante **estados de dispersión de H**) la condición anterior se satisface.

En la práctica el conjunto de *estados de dispersión de H* está formado por funciones de onda que describen haces convergentes de partículas a tiempos en el pasado remoto y haces divergentes a tiempos en el futuro distante. Por ejemplo, en el caso de dispersión potencial, cada vector que evoluciona bajo el grupo U_t está muy alejado del centro dispersor (región donde ocurre la dispersión mayormente) para tiempos remotos (tanto en el pasado como en el futuro). Es claro que por *alejado* nos referimos a que la probabilidad de encontrar a las partículas es despreciable cerca de la región de dispersión (esta es la región del espacio en donde el potencial de interacción deja de ser despreciable). Así también, es claro que (14.2) se cumple, solo si, $V_t\Psi$ satisface la propiedad anterior a tiempos remotos.

Podemos obtener más pistas acerca del conjunto de estados de dispersión al considerar por ejemplo a los estados propios del operador H . Si Ψ es un vector propio de H , es decir, $H\Psi = \lambda\Psi$, para alguna $\lambda \in \mathbb{R}$, entonces el estado, $V_t\Psi = \exp(-i\lambda t)\Psi$, es simplemente un múltiplo de Ψ , haciendo que por tanto este vector no pueda describir una situación de dispersión (ya que la probabilidad de posición es claramente constante en toda región del espacio considerado). Por esta razón, se espera que los estados de dispersión estén asociados con el espectro (incluso continuo) de H . Sin embargo, en este

momento no deseamos utilizar ninguna caracterización particular de los estados de dispersión ya que el principal objetivo de esta sección es solo presentar las bases de la condición asintótica. Simplemente vamos a suponer que a cada Hamiltoniano H le podemos asociar un conjunto de estados de dispersión $M_\infty(H)$, con las siguientes propiedades:

1. $M_\infty(H)$ es un sub espacio de \mathcal{H} .
2. $M_\infty(H)$ es invariante bajo el grupo $\{\exp(-iHt)\}$.

Claramente la condición 1) significa que $M_\infty(H)$ debe de ser un conjunto lineal cerrado (ya que es parte de un espacio de Hilbert). La propiedad de ser un “estado de dispersión” corresponde entonces a un observable, el cual esta representado por el operador auto adjunto $E_\infty(H)$, el cual es la proyección ortogonal con rango $M_\infty(H)$. La condición 2) es una expresión de la homogeneidad temporal que de los sistemas dispersores que consideramos aquí: La definición de los estados de dispersión, no debe depender del tiempo (sin embargo, esto no siempre se cumple para Hamiltonianos dependientes del tiempo). De esta forma, la condición 2) se puede describir como:

$$E_\infty(H) \exp(-iHt) = \exp(-iHt) E_\infty(H) \quad (14.4)$$

Ahora, reformularemos la condición asintótica de una manera mas precisa, la cual es mas cercana a las condiciones físicas de los fenómenos de dispersión típicos. En la practica, uno comienza un proceso de dispersión a tiempos muy negativos (es decir, tiempos en el pasado remoto) preparando un estado físico, cuya evolución temporal esta dada por el grupo unitario no perturbado U_t . Esto corresponde a dar directamente el estado ψ_- de (14.2). Debemos notar que en la condición (14.2), ψ_- es interpretado como el estado inicial al tiempo $t = 0$, es decir, el estado que se prepara en el pasado remoto es mas bien $U_t\psi_-$, de esta forma vemos que ψ_- debe de pertenecer al espacio $M_\infty(H_0)$. La primera parte de la condición asintótica requiere entonces la existencia de un vector $\Psi \in M_\infty(H)$, tal que se cumpla la primera ecuación de (14.2).

Ahora, la segunda parte de la condición asintótica, demanda la existencia de un vector $\psi_+ \in M_\infty(H_0)$, tal que se cumpla la segunda ecuación de (14.2), en donde Ψ es el vector que se obtuvo de la función ψ_- , a través de la primera parte condición de la condición asintótica. El estado ψ_+ , también es interpretado aquí como el estado inicial al tiempo $t = 0$, al cual la evolución temporal de Ψ , converge en el futuro remoto.

Entonces, según la figura 1 que ilustra los procesos de dispersión que cumplen con la condición asintótica, la descripción de los fenómenos de dispersión consiste en asociar a cada vector de estado inicial $\psi_- \in M_\infty(H_0)$, un vector de estado final $\psi_+ \in M_\infty(H_0)$, ambos interpretados como estados al tiempo $t = 0$. Si en el sistema que estamos estudiando no existe ningún tipo de interacción, es decir, si $U_t = V_t$, claramente tenemos que $\psi_- = \psi_+$. Mas adelante veremos que la correspondencia $\psi_- \rightarrow \psi_+$, define un operador lineal en el sub espacio $M_\infty(H_0)$, de los estados de dispersión del Hamiltoniano no perturbado. Este operador es conocido como el **operador de dispersión** \mathcal{S} y es el objeto central de toda la teoría de dispersión. La diferencia entre el operador \mathcal{S} y el operador identidad, es una expresión que tiene que ver directamente con la interacción entre los constituyentes del sistema dispersor. Es claro que si no existe ninguna interacción dentro del sistema, el operador \mathcal{S} coincide con el operador identidad por lo menos para todos los estados del sub espacio $M_\infty(H_0)$.

Ya que V_t y V_t^* , son operadores unitarios, tenemos que:

$$\begin{aligned} \|V_t\Psi - U_t\psi\|^2 &= (V_t\Psi - U_t\psi, V_t\Psi - U_t\psi) \\ &= (V_t\Psi, V_t\Psi) - (V_t\Psi, U_t\psi) - (U_t\psi, V_t\Psi) + (U_t\psi, U_t\psi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (\Psi, \Psi) - (\Psi, V_t^* U_t \psi) - (V_t^* U_t \psi, \Psi) + (V_t^* U_t \psi, V_t^* U_t \psi) \\
&= \|\Psi - V_t^* U_t \psi\|^2
\end{aligned}$$

Debemos notar que este resultado es valido en general ($\|Uf - g\| = \|f - U^*g\|$, $\forall f, g \in \mathcal{H}$, U un operador unitario). Luego, tenemos que:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|V_t \Psi - U_t \psi\| = \lim_{t \rightarrow -\infty} \|\Psi - V_t^* U_t \psi\| = 0 \quad (14.5)$$

En la primera parte de la condición asintótica se asumió que para cada $\psi_- \in M_\infty(H_0)$, existe un vector Ψ , tal que la ecuación (14.5) se cumpliera. Por tanto, esta condición es equivalente a la existencia del limite de $V_t^* U_t \psi$, cuando $t \rightarrow -\infty$, para toda $\psi \in M_\infty(H_0)$. De esta forma, definimos al **operador de onda** Ω_- en $M_\infty(H_0)$, de la siguiente manera:

$$\Omega_- \psi = \lim_{t \rightarrow -\infty} V_t^* U_t \psi, \quad \forall \psi \in M_\infty(H_0)$$

Es claro que el limite se toma con respecto a la norma del espacio de Hilbert \mathcal{H} . Este operador se interpreta de la siguiente forma: cuando se aplica a un vector $\psi \in M(H_0)$, vamos a obtener un vector de estado, al tiempo $t = 0$, el cual va a evolucionar en el pasado remoto al estado $U_t \psi$ (en el sentido de la primera ecuación de (14.2)). Podemos definir al operador Ω_- en todo el espacio de Hilbert en el que estemos trabajando, simplemente definiendo $\Omega_- \phi = 0$ para toda ϕ en el complemento ortogonal de $M_\infty(H_0)$. De esta forma podemos definir al operador de onda Ω_- de la siguiente manera:

$$\Omega_- = s\text{-} \lim_{t \rightarrow -\infty} V_t^* U_t E_\infty(H_0) \quad (14.6)$$

De forma similar, podemos ver que la segunda parte de la condición asintótica es equivalente a que se requiera la existencia del limite, $U_t^* V_t \xi$ cuando $t \rightarrow +\infty$ y $\xi \in \text{Ran}(\Omega_-)$ ya que:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|V_t \xi - U_t \psi\| = \lim_{r \rightarrow +\infty} \|U_t^* V_t \xi - \psi\| = 0 \quad (14.7)$$

Por otro lado, también tenemos que:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|V_t \xi - U_t \psi\| = \lim_{r \rightarrow +\infty} \|\xi - V_t^* U_t \psi\| = 0 \quad (14.8)$$

De esta forma, definimos un segundo **operador de onda** Ω_+ , el cual esta dada por:

$$\Omega_+ \psi = \lim_{t \rightarrow +\infty} V_t^* U_t \psi, \quad \psi \in M_\infty(H_0)$$

Así también, podemos extender a Ω_+ a todo el espacio de Hilbert en el que estemos trabajando, simplemente definiendo $\Omega_+ \phi = 0$, para toda ϕ en el complemento ortogonal de $M_\infty(H_0)$. De esta forma podemos definir al operador de onda Ω_+ de la siguiente manera:

$$\Omega_+ = s\text{-} \lim_{t \rightarrow +\infty} V_t^* U_t E_\infty(H_0) \quad (14.9)$$

La condición asintótica se puede expresar entonces como la necesidad de la existencia de los limites (14.6) y (14.9).

El operador Ω_+ se interpreta de la siguiente forma: cuando se aplica a un vector $\psi \in M_\infty(H_0)$, vamos a obtener un vector de estado al tiempo $t = 0$, el cual va a evolucionar en el futuro distante al vector $U_t \psi$ (en el sentido de la segunda ecuación de (14.2)).

De las ecuaciones (14.7) y (14.8), podemos observar que, $\xi = \lim_{t \rightarrow +\infty} V_t^* U_t \psi = \Omega_+ \psi$, si y solo si,

$\psi = \lim_{t \rightarrow +\infty} U_t^* V_t \xi$. Entonces, de esta forma podemos ver que la existencia de Ω_+ , implica la existencia del límite $\lim_{t \rightarrow +\infty} U_t^* V_t \xi$, cuando ξ esta en el rango de Ω_+ . Pero ya que $\xi \in \text{Ran}(\Omega_-)$ tenemos que, la segunda parte de la condición asintótica se cumple, siempre que el rango del operador Ω_- este contenido en el rango del operador Ω_+ . Este postulado se debe de añadir a las condiciones de existencia de los límites (14.6) y (14.9), con el objetivo de que la descripción matemática, corresponda con la situación física dada anteriormente.

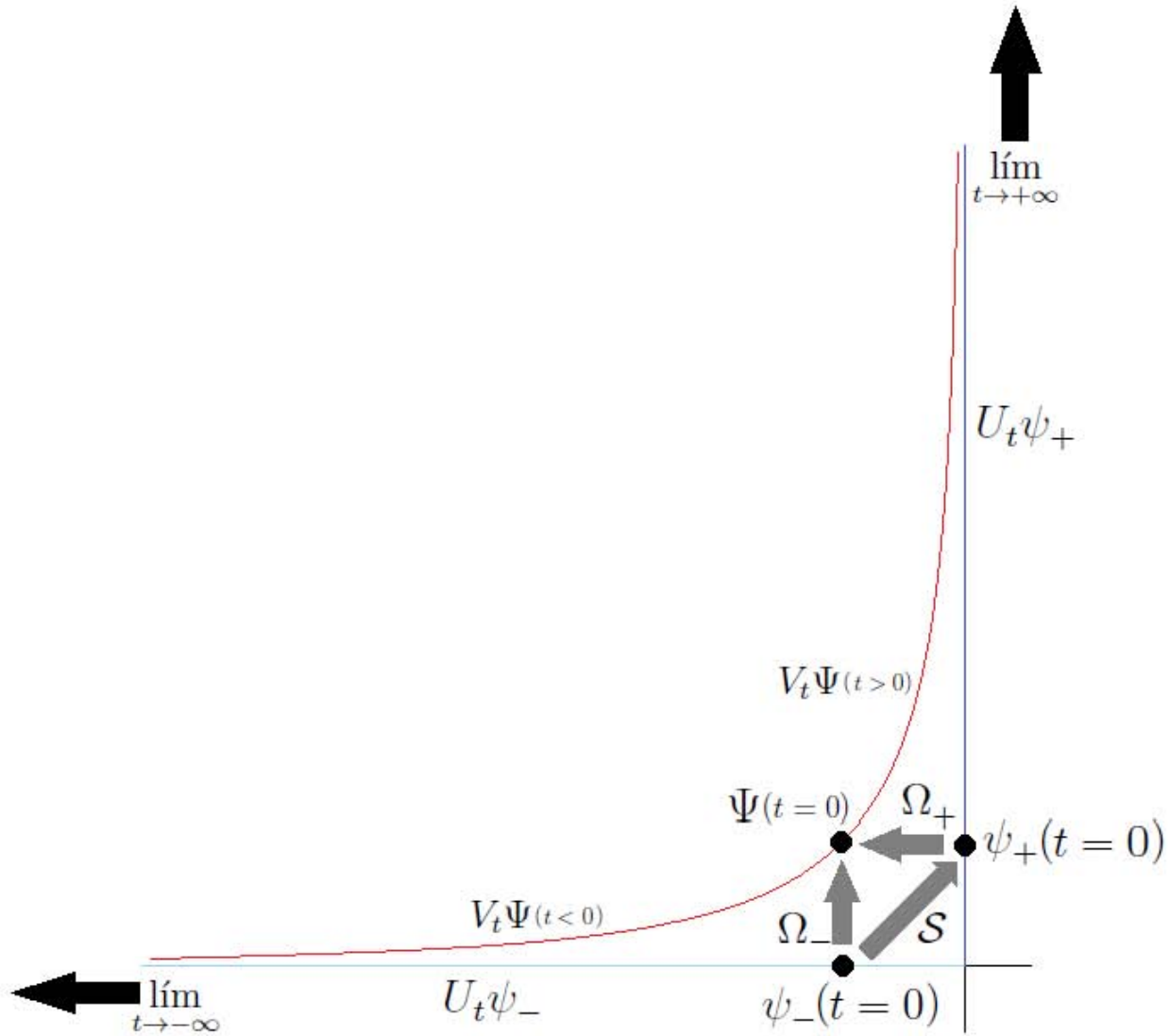


Figura 1. Ilustración de un sistema de dispersión que cumple con la condición asintótica. Para tiempos en el límite en el que $t \rightarrow \infty$ la dinámica del sistema puede ser aproximada por la evolución temporal de la función de onda libre ψ_- . Para tiempos en el límite $t \rightarrow -\infty$ la dinámica del sistema puede ser aproximada por la función de onda libre ψ_+ . Los operadores Ω_{\pm} crean la conexión entre los estados libres y el estado del sistema dispersor Ψ al tiempo $t=0$; mientras que el operador de dispersión S crea la conexión entre los estados libres ψ_- y ψ_+ .

Los operadores de onda

En esta parte nos dedicaremos a estudiar algunas de las propiedades que poseen los operadores de onda Ω_- y Ω_+ , las cuales nos van a ser útiles para dar la formulación final de la condición asintótica y para poder definir al operador de dispersión \mathcal{S} .

Comenzamos definiendo un nuevo tipo de operadores lineales.

Definición 14.1. *Diremos que un operador lineal Ω , es una isometría parcial, si cumple con las siguientes propiedades:*

1. $D(\Omega) = \mathcal{H}$.
2. $\Omega^*\Omega = P$, con P una proyección ortogonal.

Aquí, \mathcal{H} es el espacio de Hilbert del sistema físico que estamos estudiando.

Ya que $\Omega^*\Omega$, es una proyección ortogonal, es fácil ver que para este tipo de operadores tenemos que:

$$(\Omega\psi, \Omega\phi) = (\psi, \Omega^*\Omega\phi) = (\psi, P\phi) = (P\psi, P\phi) \quad (14.10)$$

Por tanto, si $\psi, \phi \in \text{Ran}(P)$, entonces $(\Omega\psi, \Omega\phi) = (\psi, \phi)$ (ya que en este caso, $P\psi = \psi$ y $P\phi = \phi$). Esto muestra que un operador como Ω , es isométrico en un subconjunto de \mathcal{H} , a saber, en $\text{Ran}(P)$, es decir, preserva la norma y el ángulo entre vectores que pertenezcan a este subconjunto. Esto explica por que a estos operadores se les conoce como “isometrías parciales”. De la expresión (14.10) es fácil ver que Ω es cero en el complemento ortogonal de $\text{Ran}(P)$: si $\psi \in (\text{Ran}(P))^\perp$, entonces $\|\Omega\psi\|^2 = \|P\psi\|^2 = 0$, implicando que $\Omega\psi = 0$. Esto también se puede escribir como:

$$\Omega(I - P)\psi = 0, \quad \forall \psi \in \mathcal{H} \quad (14.11)$$

es decir, $\Omega = \Omega P$.

Una isometría parcial también puede ser caracterizada por la propiedad (14.10):

Proposición 14.2. *Si Ω es un operador lineal con dominio \mathcal{H} y P una proyección ortogonal, tal que, $\|\Omega\psi\| = \|P\psi\|$, para toda $\psi \in \mathcal{H}$, entonces $\Omega^*\Omega = P$.*

Demostración

Ya que $\|\Omega\psi\| = \|P\psi\|$, para toda $\psi \in \mathcal{H}$, tenemos que $\|\Omega\| = \|P\|$, es decir, $\|\Omega\| = 1$ (A menos claro que $P = 0$). Luego por la proposición 8.5, tenemos que $\|\Omega^*\| = \|P\|$ además Ω^* esta definido también en todo \mathcal{H} . Ahora, por la identidad de polarización y por las propiedades del producto interno de la proyección P , tenemos que para cualquier $\psi, \phi \in \mathcal{H}$:

$$\begin{aligned} (\Omega^*\Omega\psi, \phi) &= (\Omega\psi, \Omega\phi) = \\ &= \frac{1}{4} \{ \|\Omega(\psi + \phi)\|^2 - \|\Omega(\psi - \phi)\|^2 - i \|\Omega(\psi + i\phi)\|^2 + i \|\Omega(\psi - i\phi)\|^2 \} = \\ &= \frac{1}{4} \{ \|P(\psi + \phi)\|^2 - \|P(\psi - \phi)\|^2 - i \|P(\psi + i\phi)\|^2 + i \|P(\psi - i\phi)\|^2 \} = \end{aligned}$$

$$(P\psi, P\phi) = (P\psi, \phi)$$

esto implica que, $(\Omega^*\Omega\psi - P\psi, \phi) = 0, \forall \phi \in \mathcal{H}$. Por tanto podemos concluir que, $\Omega^*\Omega\psi = P\psi, \forall \psi \in \mathcal{H}$. \square

Es claro que en caso de que tengamos $P = I$, Ω es simplemente un operador isométrico, mas aun, en este caso Ω es unitario.

El adjunto de una isometría parcial Ω^* , también es una isometría parcial. De hecho, $P' = \Omega^{**}\Omega^* = \Omega\Omega^*$ es una proyección, ya que $P'^2 = \Omega\Omega^*\Omega\Omega^* = \Omega P\Omega^* = \Omega\Omega^* = P'$ y $P' = (\Omega\Omega^*)^* = \Omega^{**}\Omega^* = P'$. En la siguiente proposición establecemos algunas de las propiedades mas importantes de las isometrías parciales, las cuales nos serán útiles mas adelante en la definición del operador de dispersión.

Proposición 14.3. *Sea Ω una isometría parcial, $\Omega^*\Omega = P$ y definamos, $\Omega\Omega^* = Q$. Entonces:*

1. $\|\Omega\| = \|\Omega^*\| = 1$, a menos que $P = 0$.
2. $\Omega P = \Omega$, $P\Omega^* = \Omega^*$, $Q\Omega = \Omega$, $\Omega^*Q = \Omega^*$.
3. El rango de Ω es un sub espacio y Q es la proyección ortogonal sobre este.
4. La restricción de Ω al sub espacio $\text{Ran}(P)$, es invertible y su inversa esta dada por Ω^* (mas precisamente, por la restricción de Ω^* a $\text{Ran}(Q)$).

Demostración

1. Ya ha sido probado en la proposición anterior.
2. Ya hemos probado que $\Omega P = \Omega$ (ec. (14.11)). Usando el hecho de que P es una proyección ortogonal ($D(P) = \mathcal{H}$ y $P^2 = P = P^*$) y las propiedades del operador adjunto (ecs. (8.30)) tenemos que, $P\Omega^* = P^*\Omega^* = (\Omega P)^* = \Omega^*$. Ahora, $Q\Omega = \Omega\Omega^*\Omega = \Omega P = \Omega$. Luego por lo que hemos mostrado anteriormente, $\Omega^*Q = \Omega^*\Omega\Omega^* = P\Omega^* = \Omega^*$.
3. La definición $Q = \Omega\Omega^*$, muestra que el rango de Q , esta contenido en el rango de Ω : si $\phi \in \mathcal{H}$ y $\phi = Q\psi$, entonces $\phi = \Omega(\Omega^*\psi) \in \text{Ran}(\Omega)$. Por tanto, $\text{Ran}(Q) \subset \text{Ran}(\Omega)$. De forma similar, usando el hecho $Q\Omega = \Omega P = \Omega$, tenemos que, $\text{Ran}(\Omega) \subset \text{Ran}(Q)$. Por lo tanto, $\text{Ran}(\Omega) = \text{Ran}(Q)$. Ya que Ω es un operador lineal y acotado ($\|\Omega\| = 1$, por tanto continuo) definido en todo el espacio, es inmediato ver que su rango es un sub espacio (cerrado) de \mathcal{H} .
4. Supongamos que $\phi \in \text{Ran}(P)$ y que $\Omega\phi = 0$. Por (14.10), tenemos que, $\|\phi\|^2 = \|\Omega\phi\|^2 = 0$, es decir $\phi = 0$. Por tanto, la restricción de Ω a $\text{Ran}(P)$ es invertible. Ya que $\Omega^*\Omega\phi = \phi$, para $\phi \in \text{Ran}(P)$, es claro que la inversa de la restricción de Ω , esta dada por la restricción de Ω^* a $\text{Ran}(P)$. \square

Para una isometría parcial Ω , al conjunto $\text{Ran}(P)$ se le conoce como **conjunto inicial** de Ω , mientras que al conjunto $\text{Ran}(Q)$ se le conoce como **conjunto final** o simplemente **rango** de Ω . Es claro que si Ω es una isometría, tenemos que $P = I$, sin embargo no siempre es cierto que en este caso, el operador de proyección Q también sea igual al operador identidad (a menos que el espacio de Hilbert en el que estemos trabajando sea de dimensión finita [15]).

El siguiente resultado muestra que los operadores de onda Ω_- (14.6) y Ω_+ (14.9), son isometrías parciales.

Proposición 14.4. *Los operadores de onda Ω_{\pm} , son isometrías parciales con conjunto inicial $M_{\infty}(H_0)$.*

Demostración

La demostración la haremos para Ω_+ , ya que para Ω_- es completamente análoga. Por la ecuación (14.9), podemos escribir a Ω_+ como:

$$\Omega_+ = s\text{-}\lim_{t \rightarrow +\infty} V_t^* U_t E_{\infty}(H_0) \quad (14.12)$$

en donde $E_\infty(H_0)$ es la proyección ortogonal con rango $M_\infty(H_0)$. De esta forma tenemos que $D(\Omega_+) = \mathcal{H}$. Mas aun, la ecuación (14.12) y tomando el hecho de que U_t y V_t son unitarios, tenemos que para toda $\psi \in \mathcal{H}$:

$$\|\Omega_+\psi\| = \lim_{t \rightarrow \infty} \|V_t^* U_t E_\infty(H_0)\psi\| = \|E_\infty(H_0)\psi\|$$

Haciendo $\Omega = \Omega_+$ y $P = E_\infty(H_0)$ en la proposición 14.2, podemos concluir que Ω_+ es una isometría parcial. Luego por la proposición 14.3 tenemos que el conjunto inicial de Ω_+ es $M_\infty(H_0)$. \square

En particular por la proposición 14.3, tenemos ahora que los operadores de onda Ω_\pm , son operadores acotados definidos en todo el espacio.

En muchos casos de interés físico, el conjunto $M_\infty(H_0)$, de estados de dispersión del Hamiltoniano no perturbado, resulta ser todo el espacio de Hilbert \mathcal{H} , en cuyo caso los operadores de onda resultan ser isometrías, en particular esto es cierto para la dispersión potencial [15].

De acuerdo con la proposición 14.3, los operadores:

$$Q_\pm = \Omega_\pm \Omega_\pm^* \tag{14.13}$$

son las proyecciones ortogonales sobre el rango del correspondiente operador de onda. Ahora estudiaremos a los adjuntos de los operadores de onda.

Proposición 14.5. *Los adjuntos de los operadores Ω_\pm , están dados por:*

$$\Omega_\pm^* = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} U_t^* V_t Q_\pm \tag{14.14}$$

Demostración

La demostración la haremos para Ω_+ , ya que para Ω_- es completamente análoga.

Utilizando el hecho de que para un operador unitario U , $\|Uf - g\| = \|f - U^*g\|$, $\forall f, g \in \mathcal{H}$, tenemos que $\forall \psi \in \mathcal{H}$:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|U_t^* V_t \Omega_+ \psi - E_\infty(H_0)\psi\| = \lim_{t \rightarrow \infty} \|\Omega_+ \psi - V_t^* U_t E_\infty(H_0)\psi\| = 0$$

de esta forma obtenemos:

$$s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} U_t^* V_t \Omega_+ = E_\infty(H_0) \tag{14.15}$$

Multiplicando la ecuación anterior por Ω_+^* del lado derecho, utilizando la definición de Q_+ y la proposición 14.3, tenemos que:

$$\begin{aligned} s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} U_t^* V_t \Omega_+ \Omega_+^* &= E_\infty(H_0) \Omega_+^* = \Omega_+^* \\ s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} U_t^* V_t Q_+ &= \Omega_+^* \end{aligned} \tag{14.16}$$

\square

Ahora estamos listos para dar la formulación final de la condición asintótica.

La condición asintótica (formulación final):

1. Existen los límites, s - $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} V_t^* U_t E_\infty(H_0) = \Omega_\pm$.
2. $\text{Ran}(Q_-) \subset \text{Ran}(Q_+)$.
Los sub espacios $\text{Ran}(Q_\pm)$, van a estar contenidos en el sub espacio $M_\infty(H)$ de estados de dispersión de \mathcal{H} . La situación mas simple, es aquella en la que:
3. $\text{Ran}(Q_+) = \text{Ran}(Q_-) = M_\infty(H)$.

†

Si la condición 3 se cumple, entonces se dice que nuestra teoría es **asintóticamente completa**, ya que a evolución $V_t \Psi$ de cualquier estado de dispersión Ψ de H , puede ser descrita asintóticamente mediante la evolución de un estado libre, tal y como sucede en la expresión (14.2). Por tanto, el tipo mas simple de sistema de dispersor que podemos encontrar, es aquel para el cual ambos operadores de onda Ω_\pm existen y sus rangos son iguales a $M_\infty(H)$, es decir, un sistema para el cual las condiciones 1 y 3 de la condición asintótica se cumplen. En este caso hablamos de un **sistema de dispersión simple**.

Ahora, enunciaremos algunas consecuencias de la condición asintótica sobre los operadores Ω_\pm . Las demostraciones de estos hechos requieren de una teoría del análisis funcional mas elaborada, por lo que nos referimos a [15] para la demostración completa de estos.

Proposición 14.6. *Si se cumple la condición 1, de la de la formulación final de la condición asintótica, entonces para todo $\tau \in \mathbb{R}$:*

1. $V_\tau \Omega_\pm = \Omega_\pm U_\tau$.
2. $U_\tau \Omega_\pm^* = \Omega_\pm^* V_\tau$.
3. $Q_\pm V_\tau = V_\tau Q_\pm$.

*Las dos primeras ecuaciones significan que los operadores de onda Ω_\pm “entrelazan”, a los grupos unitarios U_t y V_t y son conocidas comúnmente como las **relaciones de entrelazamiento**.*

4. Si $\psi \in D(H_0)$, entonces $\Omega_\pm \psi \in D(H)$ y $H \Omega_\pm \psi = \Omega_\pm H_0 \psi$.
5. Si $\phi \in D(H)$, entonces $\Omega_\pm^* \phi \in D(H_0)$ y $H_0 \Omega_\pm^* \phi = \Omega_\pm^* H \phi$.

Ahora estamos en posición de definir al operador de dispersión \mathcal{S} . Es fácil ver del esquema de la representación asintótica *fig.* que el operador \mathcal{S} esta dado por:

$$\mathcal{S} = \Omega_+^{-1} \Omega_- \quad (14.17)$$

Esta definición tiene sentido si se cumple la condición 2 de la formulación final de la condición asintótica. De hecho, el rango de Ω_- esta contenido en el de Ω_+ y además por la proposición 14.3 es invertible en su rango, mas aun por esta misma proposición, podemos remplazar a Ω_+^{-1} por Ω_+^* . Por tanto, adoptaremos la siguiente definición del operador de dispersión, valida si se cumplen las condiciones 1 y 2 de la formulación final de la condición asintótica:

$$\mathcal{S} = \Omega_+^* \Omega_- \quad (14.18)$$

14.2. El operador de dispersión

En esta parte estudiaremos algunas propiedades matemáticas del operador de dispersión \mathcal{S} , para sistemas que cumplen la formulación final de la condición asintótica. En particular veremos que \mathcal{S} también es una isometría parcial, que el conjunto $D(H_0)$ es invariante frente a este operador y que cuando nuestra teoría es asintóticamente completa \mathcal{S} es unitario.

Proposición 14.7. *El operador \mathcal{S} es una isometría parcial, con conjunto inicial $M_\infty(H_0)$, es decir:*

$$\mathcal{S}^* \mathcal{S} = E_\infty(H_0) \quad (14.19)$$

El rango de \mathcal{S} es un sub espacio de $M_\infty(H_0)$ el cual es invariante bajo el grupo unitario U_t .

Demostración

Ya que $D(\Omega_-) = D(\Omega_+^*) = \mathcal{H}$, tenemos que $D(\mathcal{S}) = \mathcal{H}$. Mas aun, de las ecuaciones (14.18) y (8.30), tenemos que, $\mathcal{S}^* \mathcal{S} = \Omega_-^* \Omega_+ \Omega_+^* \Omega_- = \Omega_-^* Q_+ \Omega_-$. Por la segunda condición de la formulación final de la condición asintótica, tenemos que el rango de Ω_- esta contenido en el rango de Q_+ , de tal forma que $Q_+ \Omega_- = \Omega_-$. Por tanto, $\mathcal{S}^* \mathcal{S} = \Omega_-^* \Omega_- = E_\infty(H_0)$, lo cual prueba que \mathcal{S} es una isometría parcial, aso como la ecuación (14.19).

El rango de \mathcal{S} es un sub espacio del rango de Ω_+^* , y el rango de este ultimo es $M_\infty(H_0)$, por la proposición 14.3.

De las relaciones de entrelazamiento (proposición 14.6) y por la definición del operador \mathcal{S} (ec. (14.18)), tenemos que para $t \in \mathbb{R}$:

$$SU_t = \Omega_+^* \Omega_- U_t = \Omega_+^* V_t \Omega_- = U_t \Omega_+^* \Omega_- = U_t \mathcal{S}$$

Por tanto $SU_t = U_t \mathcal{S}$, $\forall t \in \mathbb{R}$. Esto muestra que si $\xi \in \text{Ran}(\mathcal{S})$, entonces $U_t \xi \in \text{Ran}(\mathcal{S})$ y por lo tanto, $\text{Ran}(\mathcal{S})$ es invariante bajo el grupo unitario U_t , $\forall t \in \mathbb{R}$. \square

En la demostración de la proposición anterior, en particular hemos probado que:

$$SU_t = U_t \mathcal{S}, \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (14.20)$$

este hecho es fundamental para establecer el siguiente resultado.

Proposición 14.8. *$D(H_0)$, es invariante ante el operador \mathcal{S} , es decir, si $\psi \in D(H_0)$, entonces $\mathcal{S}\psi \in D(H_0)$.*

Demostración

Sea $\psi \in D(H_0)$, luego por el teorema de Stone (teorema 8.9), tenemos que:

$$\left\| \frac{i}{t} \mathcal{S}(U_t - I)\psi - \mathcal{S}H_0\psi \right\| \leq \|\mathcal{S}\| \cdot \left\| \frac{i}{t}(U_t - I)\psi - H_0\psi \right\| \rightarrow 0$$

cuando $t \rightarrow 0$. Esto implica que:

$$i \frac{\partial}{\partial t} (SU_t \psi) = \mathcal{S}H_0\psi$$

luego el teorema de Stone y la ecuación (14.20), implican que:

$$H_0 \mathcal{S}\psi = i \frac{\partial}{\partial t} (U_t \mathcal{S}\psi) = i \frac{\partial}{\partial t} (SU_t \psi) = \mathcal{S}H_0\psi$$

Por tanto tenemos que, $\mathcal{S}\psi \in D(H_0)$. □

Debemos hacer notar que, en general:

$$\mathcal{S}H_0 \subset H_0\mathcal{S} \tag{14.21}$$

Sin embargo, la igualdad se da si nos restringimos al sub espacio $M_\infty(H_0)$, es decir:

$$\mathcal{S}H_0E_\infty(H_0) = H_0\mathcal{S} \tag{14.22}$$

Estas dos ecuaciones son expresan una propiedad fundamental del operador de dispersión, ya que en términos físicos muestran que la energía del Hamiltoniano libre H_0 se conserva y que en este caso el proceso de dispersión es elástico.

Todas las propiedades que hemos deducido hasta ahora del operador \mathcal{S} , dependen solamente de la valides de las condiciones 1 y 2 de la formulación final de la condición asintótica. Observamos que la restricción de \mathcal{S} a $M_\infty(H_0)$ es una isometría en el espacio de Hilbert $M_\infty(H_0)$. En particular, si $M_\infty(H_0) = \mathcal{H}$ (tal como sucede en la dispersión potencial) \mathcal{S} es una isometría en \mathcal{H} . Sin embargo, las condiciones 1 y 2 antes mencionadas, no implican que \mathcal{S} sea unitario en $M_\infty(H_0)$. \mathcal{S} va a ser unitario, si y solo si, su rango es igual a $M_\infty(H_0)$ o de forma equivalente, si y solo si, $\mathcal{S}\mathcal{S}^* = E_\infty(H_0)$. Ahora, $\mathcal{S}\mathcal{S}^* = \Omega_+^* \Omega_- \Omega_-^* \Omega_+ = \Omega_+^* Q_- \Omega_+$. Si el rango de Ω_+ esta contenido en el de Ω_- , resulta que $Q_- \Omega_+ = \Omega_+$ y por tanto $\mathcal{S}\mathcal{S}^* = \Omega_+^* \Omega_+ = E_\infty(H_0)$. Aunque si el rango de Ω_- resulta ser estrictamente menor que el de Ω_+ , $Q_- \Omega_+$ va a ser cero en un subconjunto no trivial de $M_\infty(H_0)$. Por tanto $\mathcal{S}\mathcal{S}^*$ va a ser una proyección estrictamente menor que $E_\infty(H_0)$ y \mathcal{S} no va a ser unitario.

Lo anterior es un esquema de la demostración de la siguiente proposición.

Proposición 14.9. *El operador de dispersión \mathcal{S} es unitario en $M_\infty(H_0)$, si y solo si, el rango de Ω_+ es igual al de Ω_- . En particular \mathcal{S} es unitario si nuestra teoría es asintóticamente completa.*

Ahora, resumimos los principales resultados de esta sección para el caso mas usual, el cual se da cuando $M_\infty(H_0) = \mathcal{H}$. Hemos visto que la condición asintótica nos conduce de una manera muy natural a postular la existencia de los operadores de onda $\Omega_\pm = s\text{-}\lim V_t^* U_t$, cuando $t \rightarrow \pm\infty$ (recordemos que aquí el limite se toma respecto a la norma del espacio de Banach de los operadores acotados). Estos son operadores isométricos, los cuales “entrelazan”^a los Hamiltonianos H_0 y H . El operador de dispersión \mathcal{S} se relaciona de una forma muy sencilla con estos operadores a través de la ecuación $\mathcal{S} = \Omega_+^* \Omega_-$. \mathcal{S} es una isometría que conmuta con el Hamiltoniano libre H_0 . El hecho de que en este caso \mathcal{S} sea un operador unitario, no es una consecuencia directa de la existencia de los operadores de onda solamente, si no que mas bien es una hipótesis adicional, la cual sin embargo se verifica si nuestra teoría es asintóticamente completa.

Capítulo 15

Representaciones espectrales

Como hemos visto anteriormente, el espacio $L^2(\mathbb{R}^n)$ está formado por funciones de cuadro integrable (o más bien por clases de equivalencia de este tipo de funciones), con dominio en \mathbb{R}^n y valores en \mathbb{C} , el cual es un espacio de Hilbert de dos dimensiones. Una generalización natural de una estructura como la anterior, sería el considerar funciones que toman valores en un espacio vectorial más general, por ejemplo en un cierto espacio de Hilbert \mathcal{H}_0 de dimensión arbitraria. Para esto, supongamos que λ es un subconjunto de la recta real, medible respecto a la medida de Lebesgue y que \mathcal{H}_0 es un espacio de Hilbert separable. Ahora, consideremos una función F de la forma:

$$F : \lambda \rightarrow \mathcal{H}_0$$

esto es, F es una función que toma un elemento de $\lambda \in \lambda$ (un número real) y le asocia un vector f del espacio de Hilbert \mathcal{H}_0 . A una función de este tipo la conoceremos simplemente como una **función vectorial**.

Usaremos la notación f_λ para el valor (en \mathcal{H}_0) de la función F en el punto λ y denotaremos a la función F por medio de la colección $\{f_\lambda\}$ de vectores de \mathcal{H}_0 ($F = \{f_\lambda\}$). Diremos que una función como F es **medible**, si para cada vector $h \in \mathcal{H}_0$ la función con valores complejos $(h, f_\lambda)_0$ es medible en el sentido de Lebesgue, en donde (\cdot, \cdot) es el producto escalar de \mathcal{H}_0 .

Si $F = \{f_\lambda\}$ y $G = \{g_\lambda\}$, son dos funciones vectoriales medibles, entonces la función compleja $(f_\lambda, g_\lambda)_0$ también es medible, como función de $\lambda \in \lambda$. Esto es consecuencia de la expresión:

$$(f_\lambda, g_\lambda)_0 = \sum_{k=1}^{\infty} (f_\lambda, e_k)_0 (e_k, g_\lambda)_0$$

en donde $\{e_k\}$ es una base ortonormal de \mathcal{H}_0 y del hecho de que el límite de una sucesión de funciones medibles es de nuevo una función medible (en caso de que tal límite exista).

Diremos que las funciones vectoriales medibles $F = \{f_\lambda\}$ y $G = \{g_\lambda\}$, son equivalentes ($F \sim G$), si y solo si, son diferentes solamente en un conjunto de medida cero, es decir:

$$F \sim G \Leftrightarrow m\{\lambda \in \lambda \mid f_\lambda \neq g_\lambda\} = 0 \tag{15.1}$$

en donde m denota la medida de Lebesgue. La demostración de que en efecto la relación \sim , es de equivalencia en el caso de las funciones vectoriales, es completamente análoga a la demostración de la proposición 3.3.

Tal y como sucede con el espacio de funciones $L^2(\mathbb{R}^n)$, denotaremos por $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$ al espacio de funciones vectoriales medibles (o más bien de clases de equivalencia según (15.1)), las cuales satisfacen:

$$\|F\|^2 = \int_{\lambda} \|f_\lambda\|_0^2 d\lambda < \infty \tag{15.2}$$

Las operaciones de suma de vectores, multiplicación de un vector por un escalar (el cual pertenece al campo sobre el cual está \mathcal{H}_0) y la definición del un producto escalar de dos vectores de $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$, están dadas por las relaciones:

$$F + G = \{f_\lambda + g_\lambda\} \quad (15.3)$$

$$\alpha F = \{\alpha f_\lambda\} \quad (15.4)$$

$$(F, G) = \int_\lambda (f_\lambda, g_\lambda)_0 d\lambda \quad (15.5)$$

En donde $F = \{f_\lambda\}$ y $G = \{g_\lambda\}$. Es fácil ver que la integral (15.5) existe para $F, G \in L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$ (es decir, de que $|(F, G)| < \infty$). Primero tenemos que $(\|f_\lambda\|_0 - \|g_\lambda\|_0)^2 \geq 0$, lo cual implica que:

$$\|f_\lambda\|_0 \cdot \|g_\lambda\|_0 \leq \frac{1}{2} (\|f_\lambda\|_0^2 + \|g_\lambda\|_0^2)$$

Ahora, por la desigualdad de Schwarz y la condición (15.2), tenemos que:

$$|(F, G)| \leq \int_\lambda |(f_\lambda, g_\lambda)_0| d\lambda \leq \int_\lambda \|f_\lambda\|_0 \cdot \|g_\lambda\|_0 d\lambda \leq \frac{1}{2} \left(\int_\lambda \|f_\lambda\|_0^2 d\lambda + \int_\lambda \|g_\lambda\|_0^2 d\lambda \right) < \infty$$

Se puede verificar que el espacio $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$, cumple con todos los axiomas de un espacio de Hilbert, incluyendo la propiedad de completitud, de la misma forma como se hizo con $L^2(\mathbb{R}^n)$. Incluso de esta misma forma se puede mostrar que $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$ es un espacio separable.

Supongamos que $\{e_k\}$ es una base ortonormal de \mathcal{H}_0 y hagamos:

$$\alpha_k(\lambda) = (e_k, f_\lambda)_0 \quad (15.6)$$

algunas veces es conveniente expresar todas las propiedades de $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$ en términos de las “funciones coordenadas” $\alpha_k(\lambda)$. En particular, una función $F = \{f_\lambda\}$ pertenece a $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$, si y solo si:

$$\sum_k \int_\lambda |\alpha_k(\lambda)|^2 d\lambda < \infty \quad (15.7)$$

Una propiedad muy importante del espacio de Hilbert $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$ que usaremos con frecuencia en el desarrollo siguiente, es la siguiente: Existe una sucesión $\{F_n\}_n \subset L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$ ($F_n = \{f_{n,\lambda}\}$), tal que, para cada $\lambda \in \lambda$ fijo, el conjunto $\{f_{n,\lambda}\}_n \subset \mathcal{H}_0$, es un **conjunto fundamental** de \mathcal{H}_0 . En un espacio de Hilbert se dice que un conjunto C es fundamental, si el conjunto de todas las combinaciones lineales finitas de elementos de C , es denso en este espacio de Hilbert. Esto se puede ver en el espacio \mathcal{H}_0 , escribimos $f_{n,\lambda} = e_n t(\lambda)$, en donde $\{e_n\}$ es una base ortonormal de \mathcal{H}_0 y $t(\lambda)$ es una función medible de cuadrado integrable, la cual es diferente de cero $\forall \lambda \in \lambda$.

Con la notación que acabamos de introducir, observamos que podemos escribir a $L^2(\mathbb{R}^n)$, como $L^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{C})$. Ahora, veamos como podemos representar al espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$, en la forma $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$. Esta representación nos va a ser útil para dar una nueva definición del operador de dispersión \mathcal{S} en términos del momento de un sistema.

Denotemos por S^2 , a la esfera unitaria con centro en el origen de \mathbb{R}^3 . Ya que S^2 es una superficie de dos dimensiones, a cada punto de esta lo podemos identificar mediante el ángulo polar θ ($0 \leq \theta \leq \pi$) y el ángulo azimutal ϕ ($0 \leq \phi \leq 2\pi$). Sea $L^2(S^2)$ el espacio de funciones (o mas bien clases de equivalencia) $f(\theta, \phi)$, tales que:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |f(\theta, \phi)|^2 \sin(\theta) d\theta d\phi < \infty \quad (15.8)$$

Introduciendo coordenadas esféricas en el espacio \mathbb{R}^3 , tenemos que para cualquier función $f \in L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$\|f\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |f(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin(\theta) d\phi d\theta dr \quad (15.9)$$

de la ecuación anterior podemos observar claramente que, $r f(r, \cdot, \cdot) \in L^2(S^2)$, para casi toda r en el intervalo $[0, \infty)$ respecto a la medida de Lebesgue. Por tanto podemos definir a la función $F = \{r f(r, \cdot, \cdot)\} \in L^2([0, \infty), L^2(S^2))$. De esta forma podemos concluir que $L^2(\mathbb{R}^3) \subset L^2([0, \infty), L^2(S^2))$.

Por otro lado, tomemos una función $F = \{f_r\} \in L^2([0, \infty), L^2(S^2))$. Luego esta función satisface la condición (15.2):

$$\|F\|^2 = \int_0^\infty \|f_r\|_{S^2}^2 dr = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |f_r(\theta, \phi)|^2 \sin(\theta) d\phi d\theta dr < \infty \quad (15.10)$$

de aquí observamos que $f_r(\theta, \phi)$, es una función de las variables (r, θ, ϕ) , es decir, podemos escribir $f_r(\theta, \phi) = f(r, \theta, \phi)$, cuya integral en todo \mathbb{R}^3 es finita (es claro que, para que lo anterior tenga sentido f debe de ser de la forma \hat{f}/r , para una cierta función medible \hat{f}).

De esta forma, hemos mostrado que:

$$L^2([0, \infty), L^2(S^2)) = L^2(\mathbb{R}^3) \quad (15.11)$$

Mas adelante veremos que esta igualdad también se puede dar en términos de un isomorfismo.

Regresemos ahora al estudio de los espacios $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$ en general. Supongamos ahora que $\phi(\cdot)$ es una función compleja esencialmente acotada en λ (respecto a la medida de Lebesgue de λ). Ahora hagamos,

$$L_\phi F = \{\phi(\lambda) f_\lambda\} \quad (15.12)$$

en donde $F = \{f_\lambda\} \in L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$. Observamos que:

$$\|L_\phi F\|^2 = \int_\lambda |\phi(\lambda)|^2 \cdot \|f_\lambda\|_0^2 d\lambda \leq \text{ess-sup}(|\phi|^2) \|F\|^2$$

Por tanto, podemos concluir que L_ϕ definido en (15.12), pertenece al conjunto de operadores lineales acotados de $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$. A este conjunto de operadores lo denotaremos como $B(L^2(\lambda, \mathcal{H}_0))$. Mas aun, es fácil ver que:

$$\|L_\phi\| = \text{ess-sup}_{\lambda \in \lambda} |\phi(\lambda)| \quad (15.13)$$

De lo anterior podemos ver que se sugiere la siguiente generalización. Para cada $\lambda \in \lambda$ supongamos que $A(\lambda)$ es un operador que pertenece a $B(\mathcal{H}_0)$ (el conjunto de operadores lineales acotados de \mathcal{H}_0). Vemos que esto define a una función $A : \lambda \rightarrow B(\mathcal{H}_0)$ cuyos valores son operadores, la cual diremos que es medible si para cada $F = \{f_\lambda\} \in L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$, la función vectorial $\{A(\lambda) f_\lambda\}$ es medible. Luego, para esta función medible con valores en $B(\mathcal{H}_0)$, definimos en el espacio de Hilbert $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$ a un operador A , $A : D(A) \subset L^2(\lambda, \mathcal{H}_0) \rightarrow L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$, cuyo dominio esta dado por:

$$D(A) = \left\{ F \in L^2(\lambda, \mathcal{H}_0) \mid \int_\lambda \|A(\lambda) f_\lambda\|_0^2 d\lambda < \infty \right\} \quad (15.14)$$

el cual actúa como:

$$AF = \{A(\lambda) f_\lambda\} \quad (15.15)$$

Para este tipo de operadores, la función $\|A(\lambda)\|_0$ es medible y no negativa. Mas aun, estos operadores tienen dominio denso y son cerrados [15].

Un operador A , definido según (15.14) y (15.15) es conocido como un **operador de descomposición**. Si el operador A se puede escribir de la forma $A(\lambda) = \phi(\lambda)I_0$, en donde $\phi(\cdot)$ es una función compleja medible, finita en casi todo punto y en donde I_0 denota al operador identidad de \mathcal{H}_0 , entonces diremos que A es un **operador diagonalizable**.

Es fácil ver que un operador diagonalizable A , dado por una función ϕ , es auto adjunto, si y solo si, la función ϕ es real [15].

Comúnmente a los operadores de descomposición se les denota como:

$$A = \{A(\lambda)\} \quad (15.16)$$

Ahora, estableceremos dos proposiciones las cuales caracterizan a la clase de los operadores acotados de descomposición. Para la demostración de estos resultados nos referimos a [15].

Proposición 15.1. *Un operador de descomposición A , es acotado, si y solo si, $\|A(\lambda)\|_0$ es una función esencialmente acotada y ese caso:*

$$\|A\| = \text{ess-sup}_{\lambda \in \lambda} \|A(\lambda)\|_0 \quad (15.17)$$

Proposición 15.2. *Sean A y B , dos operadores de descomposición acotados en $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$, dados por $A = \{A(\lambda)\}$ y $B = \{B(\lambda)\}$. Entonces:*

1. $A + B = \{A(\lambda) + B(\lambda)\}$; $\alpha A = \{\alpha A(\lambda)\}$.
2. $AB = \{A(\lambda)B(\lambda)\}$.
3. $A^* = \{A(\lambda)^*\}$.

Ahora, consideremos un operador diagonalizable en especial A , a saber, el cual en el que $\phi(\lambda) = \lambda$. así, A esta dado por:

$$A = \{\lambda I_0\} \quad (15.18)$$

y ya que $\lambda \in \mathbb{R}$, es claro que A es un operador auto adjunto. Definimos ahora al operador:

$$E_\mu = \{\chi_\mu(\lambda)I_0\} \quad (15.19)$$

en donde χ_μ es la función característica del conjunto $\lambda_\mu = \lambda \cap (-\infty, \mu]$, y es fácil ver que:

$$(F, E_\mu G) = \int_{\lambda_\mu} (f_\lambda, g_\lambda)_0 d\lambda \quad (15.20)$$

Luego, para toda $G \in D(A)$,

$$(F, AG) = \int_{\lambda} \lambda (f_\lambda, g_\lambda)_0 d\lambda = \int_{\lambda} \lambda d(F, E_\lambda G) \quad (15.21)$$

esto muestra que podemos asociar un operador auto adjunto del tipo dado por (15.18) (de hecho, una cierta clase de operadores que conmutan, a saber, los operadores diagonalizables) con el espacio

$L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$. El recíproco de este enunciado también es válido y es equivalente al teorema espectral [15].

Todo operador de descomposición $A = \{A(\lambda)\}$, conmuta con todos los operadores L_ϕ , definidos en (15.12). Esto se puede ver de la siguiente manera. Ya que ϕ es esencialmente acotada, tenemos que:

$$\|AL_\phi G\|^2 = \int_\lambda |\phi(\lambda)|^2 \|A(\lambda)g_\lambda\|_0^2 d\lambda \leq \text{ess-sup}_{\lambda \in \lambda} (|\phi(\lambda)|^2) \int_\lambda \|A(\lambda)g_\lambda\|_0^2 d\lambda < \infty$$

para toda $G \in D(A)$. así también, para estas mismas funciones G , tenemos:

$$AL_\phi G = \{A(\lambda)(L_\phi g)_\lambda\} = \{\phi(\lambda) A(\lambda)g_\lambda\} = L_\phi AG$$

lo cual implica que $L_\phi A \subset AL_\phi$. El recíproco de esta propiedad es el contenido de la siguiente proposición, la cual tiene una importancia relevante en la teoría de dispersión.

Proposición 15.3. *Sea B un operador acotado en $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$ que conmuta con el operador auto adjunto A , dado por (15.18). Entonces B es un operador de descomposición, dado por $B = \{B(\lambda)\}$, con norma:*

$$\|B\| = \text{ess-sup}_{\lambda \in \lambda} \|B(\lambda)\| < \infty \quad (15.22)$$

La demostración de esta proposición (y del siguiente corolario) requiere de una teoría más elaborada del análisis funcional, por lo que nos referimos a [15] para su demostración.

Corolario 15.4. *Un operador de descomposición acotado $B = \{B(\lambda)\}$ es invertible acotado (auto adjunto, unitario, parcialmente isométrico respectivamente), si y solo si, $B(\lambda)$ es invertible acotado (auto adjunto, unitario, parcialmente isométrico respectivamente), para casi toda $\lambda \in \lambda$.*

Regresemos ahora al caso concreto en el que estábamos trabajando con $L^2(\mathbb{R}^3)$ en su representación como $L^2(\lambda, \mathcal{H}_0)$, solo que en esta ocasión en la representación del espacio de momentos (es decir, en lugar de trabajar con las funciones $f(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ como lo hicimos anteriormente, trabajaremos con sus transformadas de Fourier $\hat{f}(\mathbf{k})$, $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$). Haciendo $\lambda = |\mathbf{k}|^2 = k^2$. Ahora para cada función $f \in L^2(\mathbb{R}^3)$ y para casi toda $\lambda \in [0, \infty)$ definimos al vector $f_\lambda \in L^2(S^2)$ como:

$$f_\lambda(\theta, \phi) = \frac{\lambda^{1/4}}{\sqrt{2}} \hat{f}(\lambda^{1/2}, \theta, \phi) \quad (15.23)$$

Luego, por el teorema 4.3, pasando a coordenadas esféricas y haciendo el cambio de variable $k \rightarrow \lambda^{1/2}$, tenemos que:

$$\begin{aligned} \|f\|^2 &= \|\hat{f}\|^2 = \int_0^\infty \int_{S^2} k^2 |\hat{f}(k, \theta, \phi)|^2 dk \sin(\theta) d\theta d\phi \\ &= \int_0^\infty \int_{S^2} \lambda |\hat{f}(\lambda^{1/2}, \theta, \phi)|^2 \frac{1}{2} \lambda^{-1/2} d\lambda \sin(\theta) d\theta d\phi \\ &= \int_0^\infty \int_{S^2} \left| \lambda^{1/4} \cdot \sqrt{2} \cdot \hat{f}(\lambda^{1/2}, \theta, \phi) \right|^2 \sin(\theta) d\theta d\phi d\lambda = \int_0^\infty \|f_\lambda\|_{L^2(S^2)}^2 d\lambda \end{aligned} \quad (15.24)$$

Supongamos ahora que G_0 es el espacio de Hilbert definido por (15.23) y (15.24). Es claro que,

$$G_0 = L^2([0, \infty), L^2(S^2)) \quad (15.25)$$

y que $L^2(\mathbb{R}^3)$ es unitariamente isomorfo a G_0 , con el isomorfismo \mathcal{U}_0 , dado por:

$$(\mathcal{U}_0 f)_\lambda(\bar{\omega}) = 2^{-1/2} \cdot \lambda^{1/4} \cdot \hat{f}(\lambda^{1/2} \bar{\omega}), \quad \bar{\omega} \in S^2 \quad (15.26)$$

Recordando la definición del Hamiltoniano de una partícula libre H_0 (6.13) y utilizando la propiedad (4.24) de la transformada de Fourier de la derivada de una función, tenemos que para toda $\psi \in D(H_0)$:

$$(\mathcal{U}_0 H_0 \psi)_\lambda = \lambda (\mathcal{U}_0 \psi)_\lambda \quad (15.27)$$

o de forma equivalente, $\mathcal{U}_0 H_0 \mathcal{U}_0^{-1} = \{\lambda I_0\}$ (con I_0 el operador identidad de $L^2(S^2)$). La representación (15.25) de $L^2(\mathbb{R}^3)$ es conocida como la **representación espectral** del espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$ relativa a H_0 , o simplemente como la **representación espectral** de H_0 . Para simplificar la notación, usualmente se identifica a $f \in L^2(\mathbb{R}^3)$ con $\mathcal{U}_0 f \in G_0$ y en lugar de (15.27), se escribe $(H_0 \psi)_\lambda = \lambda \psi_\lambda$.

De la sección anterior, sabemos que el operador de dispersión \mathcal{S} definido en la ecuación (14.18), conmuta con el operador $H_0 E_\infty(H_0)$. Cuando H_0 es el Hamiltoniano libre, tenemos que $E_\infty(H_0) = I$, y por tanto en este caso, \mathcal{S} conmuta con H_0 . De esta forma por la proposición 15.3 y el corolario 15.4, concluimos que \mathcal{S} es un operador de descomposición acotado, en la representación (15.25) de $L^2(\mathbb{R}^3)$. Lo anterior quiere decir que:

$$\mathcal{U}_0 \mathcal{S} \mathcal{U}_0^{-1} = \{\mathcal{S}(\lambda)\}, \quad \text{y que } \mathcal{S}(\lambda)^* \mathcal{S}(\lambda) = I_0 \quad (15.28)$$

para casi toda $\lambda \in [0, \infty)$, en donde I_0 es el operador identidad de $L^2(S^2)$.

Si \mathcal{S} es unitario, también lo es $\mathcal{S}(\lambda)$ para casi toda $\lambda \in [0, \infty)$. Al operador $\mathcal{S}(\lambda)$ se le conoce frecuentemente como la matriz \mathcal{S} a energía λ .

Hasta el momento toda la teoría de dispersión que hemos desarrollado es muy general, en el sentido que esta solo presupone el conocimiento de dos grupos unitarios uniparametricos y la existencia de ciertos limites en un espacio de Hilbert. No hemos usado ningún tipo de propiedad espectral del Hamiltoniano no perturbado y los operadores de posición y de momento, los cuales son los observables básicos de la mecánica cuántica, no han jugado ningún papel en ninguno de nuestros argumentos. Sin embargo, al observar detalladamente la hipótesis asintótica (que es la condición que cumplen todos los sistemas de dispersión que estamos considerando) vemos que no tiene ningún sentido el preguntarnos algo acerca de estos observables, ya que con los estados (funciones del espacio de Hilbert del sistema) con los que en verdad estamos trabajando gracias al operador de dispersión \mathcal{S} , son ψ_- y ψ_+ y no Ψ , los cuales son tales que, por hipótesis tienen valores esperados de la posición en $\pm\infty$ para $t \rightarrow \infty$, es claro que a cualquier otro tiempo el valor esperado de la posición para los estados ψ_- y ψ_+ va a dar un valor completamente equivocado, ya que a otros tiempos esta es una propiedad que corresponde solo al estado Ψ . Por otro lado, ya que estamos trabajando con sistemas de dispersión elástica, es de esperarse que el valor esperado del momento del sistema sea una cantidad constante en el tiempo.

Sin embargo esto no marca el fin de la información que podamos extraer de un sistema de dispersión, ya que como veremos mas adelante (y tal como es el propósito de este texto) una cantidad de interés para los sistemas de dispersión que involucran mas de una partícula (en nuestro caso dos) es la *pureza* (ec. (12.22)) que estos poseen, antes del proceso de dispersión (como siempre en el pasado lejano, $t \rightarrow -\infty$) y después de este (en el futuro remoto $t \rightarrow \infty$).

Para hacer esto, primero debemos de estudiar la descripción que tiene la teoría de dispersión que hemos desarrollado hasta ahora, en el caso particular en el que nuestro sistema dispersor esta compuesto de dos partículas (sistema binario) tales como los que hemos estudiado en secciones anteriores.

Capítulo 16

Dispersión de dos partículas

El objetivo principal de este capítulo es el de mostrar que el problema de dispersión para un sistema formado por dos partículas cuánticas, se puede reducir al problema de la dispersión de una sola partícula en un campo externo, bajo la suposición de que la interacción entre los dos subsistemas es invariante bajo traslaciones del sistema completo. Un ejemplo de tal interacción, es la de un potencial V que depende solamente de la distancia relativa $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ de los subsistemas, del cual ya hemos hecho mención en el capítulo de sistemas binarios.

Supongamos que \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 son los espacios de Hilbert de los estados de la primera y de la segunda partícula respectivamente. Si las dos partículas son distinguibles, entonces, el espacio de Hilbert \mathcal{H} que describe los estados del sistema compuesto, es el producto tensorial de \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 , es decir, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

En caso de que tengamos dos partículas idénticas, \mathcal{H} es el sub espacio simétrico o anti simétrico de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, según el tipo de partículas con las que estemos trabajando, bosones o fermiones, respectivamente. El sub espacio simétrico (respectivamente el sub espacio anti simétrico) de \mathcal{H} es aquel que generado por el conjunto de todos los vectores de la forma $\psi_1 \otimes \psi_2 + \psi_2 \otimes \psi_1$ (respectivamente $\psi_1 \otimes \psi_2 - \psi_2 \otimes \psi_1$), con $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}_1$. Notemos que en este caso, necesariamente tenemos que $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2$.

Con el objetivo de ser concretos, solo discutiremos el caso de dos partículas distinguibles, no relativistas, sin spin, de masas m_1 y m_2 .

El espacio de Hilbert del sistema compuesto esta dado por $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$, el cual como hemos visto anteriormente, lo podemos identificar con el espacio $L^2(\mathbb{R}^6)$. De esta forma, escribimos $\mathbf{x}_1 = (x_{1,1}, x_{1,2}, x_{1,3})$ como la variable del primer espacio $L^2(\mathbb{R}^3)$ y $\mathbf{x}_2 = (x_{2,1}, x_{2,2}, x_{2,3})$ como la variable del segundo espacio, las cuales definen a las variables del espacio \mathcal{H} . De forma similar, a las variables de la transformada de Fourier de las funciones en \mathcal{H} (respecto a $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$), las denotaremos por \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 .

El Hamiltoniano libre \mathcal{H}_0 , es la suma de los Hamiltonianos libres de los subsistemas $H_{0,1} \otimes \mathbf{1}$ y $\mathbf{1} \otimes H_{0,2}$ de cada partícula:

$$D(\mathcal{H}_0) = \left\{ \Psi \in L^2(\mathbb{R}^6) \mid \mathbf{k}_1^2 \hat{\Psi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \in L^2(\mathbb{R}^6) ; \mathbf{k}_2^2 \hat{\Psi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \in L^2(\mathbb{R}^6) \right\}$$

y

$$(\mathcal{F}\mathcal{H}_0\Psi)(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \left(\frac{\mathbf{k}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{k}_2^2}{2m_2} \right) \hat{\Psi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \quad (16.1)$$

Luego, como hemos visto anteriormente, el grupo de evolución libre $U_t = \exp(-iH_0t)$, se factoriza como:

$$U_t = U_t^{(1)} \otimes U_t^{(2)} \quad (16.2)$$

en donde $U_t^{(s)} = \exp(-iH_{0,s}t)$ el cual actúa sobre $L^2(\mathbb{R}^3)$, $s = 1, 2$. La ecuación (16.2) expresa el hecho de que las partículas se mueven independientemente; si el estado inicial del sistema es un estado producto $\Psi = \psi_1 \otimes \psi_2$, entonces es claro que $U_t\Psi$ continua siendo un estado producto para todo tiempo.

A diferencia de como hemos trabajado en las secciones anteriores, en esta ocasión desarrollaremos los siguientes conceptos en el espacio de momentos de nuestro sistema de dos partículas.

Tal y como lo hicimos en el capítulo de sistemas binarios, introducimos a la masa total $M = m_1 + m_2$ y a la masa reducida $m = m_1 \cdot m_2 / M$ (ecs. (10.26)). Ahora introducimos los observables de momento total \mathbf{p}_{tot} y de momento relativo \mathbf{p}_{rel} , dados por los siguientes operadores:

$$\mathbf{p}_{tot} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 ; \quad \mathbf{p}_{rel} = \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{M} \quad (16.3)$$

A través de la identidad:

$$\frac{1}{2M}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)^2 + \frac{1}{2mM^2}(m_2\mathbf{k}_1 - m_1\mathbf{k}_2)^2 = \frac{\mathbf{k}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{k}_2^2}{2m_2}$$

observamos que podemos escribir al Hamiltoniano del sistema compuesto H_0 , en la representación de momentos, como:

$$H_0 = H_{0,CM} + H_{0,rel} \quad (16.4)$$

en donde $H_{0,CM}$ y $H_{0,rel}$ están dados por los operadores de multiplicación:

$$H_{0,CM} = \frac{\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2}{2M} ; \quad H_{0,rel} = \frac{(m_2\mathbf{k}_1 - m_1\mathbf{k}_2)^2}{2mM^2} \quad (16.5)$$

sobre las transformadas de Fourier de las funciones de $L^2(\mathbb{R}^6)$, ya que estamos en la representación de momentos.

Ahora, introducimos en el espacio de momentos a las variables:

$$\mathbf{k}_{CM} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 ; \quad \mathbf{k}_{rel} = \frac{m_2\mathbf{k}_1 - m_1\mathbf{k}_2}{M} \quad (16.6)$$

en donde nos referimos a \mathbf{k}_{CM} y a \mathbf{k}_{rel} , como el *momento del centro de masa* y el *momento relativo* respectivamente, en analogía con los sistemas clásicos [17]. Mas aun, el jacobiano de la transformación $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rightarrow \mathbf{k}_{CM}, \mathbf{k}_{rel}$, es uno. De esta forma, podemos escribir el producto escalar de $L^2(\mathbb{R}^6)$ directamente en estas nuevas variables:

$$\begin{aligned} (\psi, \phi) &= (\hat{\psi}, \hat{\phi}) = \int_{\mathbb{R}^6} \overline{\hat{\psi}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \hat{\phi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^6} \overline{\hat{\psi}}(\mathbf{k}_{CM}, \mathbf{k}_{rel}) \hat{\phi}(\mathbf{k}_{CM}, \mathbf{k}_{rel}) d\mathbf{k}_{CM} d\mathbf{k}_{rel} \end{aligned}$$

Lo anterior significa que podemos identificar a $H = L^2(\mathbb{R}^6)$ con $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$ de una forma distinta: Cuando tomemos las transformadas de Fourier de funciones en esta nueva descomposición

de H , la variable en el primer factor deberá de ser \mathbf{k}_{CM} y en el segundo factor deberá de ser \mathbf{k}_{rel} . En el resto del desarrollo de este capítulo, todas las descomposiciones de operadores en forma productos tensoriales, serán respecto a esta última estructura tensorial de H (es decir, estas descomposiciones serán con respecto a \mathbf{k}_{CM} y a \mathbf{k}_{rel}). En particular los Hamiltonianos libres los escribiremos como:

$$H_{0,CM} = H_{0,CM} \otimes I \ ; \ H_{0,rel} = I \otimes H_{0,rel} \quad (16.7)$$

Ahora, para determinar las variables de posición en esta nueva factorización de H , debemos de tomar en cuenta el cambio de variables anterior ($\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rightarrow \mathbf{k}_{CM}, \mathbf{k}_{rel}$) en la transformada inversa de Fourier, ya que si realizamos este procedimiento directamente no vamos a obtener una función de las variables $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$. Sin embargo, haciendo el cambio de coordenadas $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rightarrow \mathbf{X}, \mathbf{x}$ en el espacio de posiciones, en donde \mathbf{X} y \mathbf{x} es la coordenada del centro de masa y la coordenada relativa, respectivamente (ec. (10.24)), y dado que el jacobiano de esta transformación también es uno, es fácil ver que:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \mathcal{F}^{-1}(\hat{\Psi})(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^6} \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}_1 + i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^6} \exp(i\mathbf{k}_{CM} \cdot \mathbf{X} + i\mathbf{k}_{rel} \cdot \mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{k}_{CM}, \mathbf{k}_{rel}) d\mathbf{k}_{CM} d\mathbf{k}_{rel} = \mathcal{F}_{CM,r}^{-1}(\hat{\Psi})(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = \Psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \end{aligned} \quad (16.8)$$

En donde $\mathcal{F}_{CM,r}$, denota la transformada de Fourier respecto a al sistema de coordenadas (\mathbf{X}, \mathbf{x}) y $(\mathbf{k}_{CM}, \mathbf{k}_{rel})$.

Debemos observar que la ecuación (16.4) implica que el grupo de evolución libre U_t , también se factoriza en la nueva descomposición de \mathcal{H} como un producto tensorial:

$$U_t = U_{t,CM} \otimes U_{t,rel} \quad (16.9)$$

en donde,

$$U_{t,CM} = \exp(-iH_{0,CM}t) \ ; \ U_{t,rel} = \exp(-iH_{0,rel}t) \quad (16.10)$$

actúan en su respectivo factor de $L^2(\mathbb{R}^3)$. Por tanto, bajo la evolución libre el movimiento del centro de masa y el movimiento relativo son independientes. Comparando esto con la ecuación (16.2), observamos que también podemos considerar que nuestro sistema esta formado por dos partículas ficticias, no relativistas y sin spin, de masas M y m respectivamente.

Por otro lado, supongamos ahora que el grupo total de evolución V_t , se puede factorizar de la forma:

$$V_t = U_{t,CM} \otimes V_{t,rel} \quad (16.11)$$

derivando esta ecuación respecto de t y por el teorema de Stone (teorema 8.9), observamos que el Hamiltoniano total H , debe de ser una extensión del operador $H_{0,CM} \otimes I + I \otimes H_{rel}$. Recíprocamente, para que la ecuación (16.11) se cumpla, es suficiente que la diferencia $H - H_0$, es decir el factor de interacción, actúe de manera no trivial solamente en el espacio de la coordenada relativa (respectivamente en el espacio del momento relativo) de nuestro sistema de dos partículas $(\mathbf{x}, \mathbf{k}_{rel})$.

Si los operadores de onda existen, entonces por las relaciones (11.6) tenemos que:

$$\Omega_{\pm} = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} (U_{t,CM}^* U_{t,CM} \otimes V_{t,rel}^* U_{t,rel}) = I \otimes \Omega_{\pm,rel} \quad (16.12)$$

Aquí introducimos a los operadores de onda relativos, los cuales actúan sobre el espacio de Hilbert relativo H_{rel} :

$$\Omega_{\pm,rel} = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} V_{t,rel}^* U_{t,rel} \quad (16.13)$$

así también, tenemos que:

$$\mathcal{S} = \Omega_+^* \Omega_- = I \otimes \Omega_{+,rel}^* \Omega_{-,rel} = I \otimes \mathcal{S}_{rel} \quad (16.14)$$

Sin embargo, debemos de tomar en cuenta que los operadores (16.12) y (16.14), están definidos para actuar en el espacio de posiciones (\mathbf{X}, \mathbf{x}) . En especial estamos interesados en el operador de dispersión \mathcal{S} , por lo que hay que definir como actúa este en el espacio de momentos $(\mathbf{k}_{CM}, \mathbf{k}_{rel})$. Pero ya que la transformada de Fourier es una transformación unitaria en $L^2(\mathbb{R}^6)$, tenemos que el operador de dispersión en el espacio de momentos esta dado por:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{S}} &= \mathcal{F}_{CM,r} \mathcal{S} \mathcal{F}_{CM,r}^{-1} = \mathcal{F}_{CM,r} (I \otimes \mathcal{S}_{rel}) \mathcal{F}_{CM,r}^{-1} \\ &= I \otimes (\mathcal{F}_r \mathcal{S}_{rel} \mathcal{F}_r^{-1}) = I \otimes \hat{\mathcal{S}}_{rel} \end{aligned} \quad (16.15)$$

en donde \mathcal{F}_r es la transformada de Fourier respecto a las coordenadas relativas $\mathbf{x}, \mathbf{k}_{rel}$.

$$\mathcal{F}_r(\psi)(\mathbf{k}_{rel}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \exp(-i\mathbf{k}_{rel} \cdot \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (16.16)$$

$$\mathcal{F}_r^{-1}(\hat{\psi})(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \exp(i\mathbf{k}_{rel} \cdot \mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{k}_{rel}) d\mathbf{k}_{rel} \quad (16.17)$$

Lo anterior muestra que bajo la hipótesis (16.11), basta con solo resolver el problema de dispersión en el espacio $L^2(\mathbb{R}^3)$ que describe el movimiento relativo de nuestro sistema de partículas. Observamos que este problema de dispersión, es el mismo que el de una partícula no relativista, sin spin, de masa m (la masa reducida), con interacción V . Si V es un potencial que depende solamente de la distancia $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ de las dos partículas originales del sistema, el problema de dispersión se reduce a un problema *dispersión potencial*, ya que el potencial en el sistema de referencia relativo claramente esta dado por $V(\mathbf{x})$.

Mas aun, ya que hemos reducido el problema al de una sola partícula, por la ecuación (15.28) podemos dar una representación espectral (matriz de dispersión) del operador de dispersión $\hat{\mathcal{S}}$:

$$\hat{\mathcal{S}} = \{\mathcal{S}(k_{rel}^2)\} \quad (16.18)$$

en donde $k_{rel}^2 = |\mathbf{k}_{rel}|^2$.

La eliminación anterior del movimiento del centro de masa de las dos partículas, es interpretada frecuentemente como el hacer que el momento total del sistema sea cero o como el escoger un marco de referencial el cual se mueve junto con el sistema de referencia del centro de masa. En analogía con los sistemas de dispersión clásicos, al sistema de coordenadas $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ se le suele conocer como el sistema de referencia del laboratorio, mientras que al sistema de coordenadas (\mathbf{X}, \mathbf{x}) se le conoce como el sistema de referencia del centro de masa.

Capítulo 17

Dispersión a bajas energías

17.1. Cambio a unidades físicas

Ahora entramos al tema principal de este texto, el cual es el desarrollo de una expresión para la pureza de un estado cuántico asintótico de un sistema dispersor formado por dos partículas sin spin, de masas m_1 y m_2 respectivamente, cuando la dispersión entre estas ocurre a bajas energías. Para hacer esto no solo en términos matemáticos sino también en términos físicos, recordemos que en el capítulo 5, introdujimos los cambios de variable:

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} \sqrt{\frac{\hbar}{m}} ; \quad \mathbf{p} \rightarrow \sqrt{\hbar m} \mathbf{k} \quad (17.1)$$

con el objetivo de deshacernos de las constantes físicas m y \hbar para simplificar la notación en los desarrollos matemáticos posteriores. Con el cambio de variables anterior introdujimos la ecuación general de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi$$

en donde H es el operador cuántico Hamiltoniano:

$$H \psi = -\frac{1}{2} \Delta \psi + V(\mathbf{x}) \psi$$

también con estas variables introdujimos al operador de evolución temporal:

$$U(t) = e^{-iHt}$$

a la transformada de Fourier para funciones integrables como:

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}) = \mathcal{F}\psi(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

y a la transformada inversa de Fourier:

$$\psi(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{\psi}(\mathbf{k}) d\mathbf{k}$$

Ahora, para recuperar el sentido físico de los conceptos expresados en las ecuaciones anteriores, es necesario hacer el cambio de variables contrario a (17.1):

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} \sqrt{\frac{m}{\hbar}} ; \quad \mathbf{k} \rightarrow \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{\hbar m}}$$

En estas variables (las cuales son las variables físicas originales) la ecuación general de Schrödinger dependiente del tiempo esta dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi$$

con el operador Hamiltoniano:

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\mathbf{x})\psi$$

aquí debemos hacer notar que $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi$ es el operador de energía cinética en el espacio de posiciones. así también, los operadores:

$$\mathbf{p}_i \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \psi ; i = 1, \dots, n \quad (17.2)$$

son los operadores de momento en la dirección de la coordenada x_i en el espacio de posiciones.

así también, en estas variables el operador de evolución esta dado por:

$$U(t) = e^{-i\frac{t}{\hbar}H}$$

La transformada de Fourier y su inversa, para funciones integrables, están dadas por:

$$\hat{\psi}(\mathbf{p}) = \mathcal{F}\psi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

$$\psi(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \hat{\psi}(\mathbf{p}) d\mathbf{p}$$

En donde, \mathcal{F} nos lleva del espacio de posiciones \mathbf{x} al espacio de momentos \mathbf{p} mientras que \mathcal{F}^{-1} hace lo contrario.

En el espacio de momentos el operador de posición \mathbf{x}_i esta dado por:

$$\mathbf{x}_i = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} \hat{\psi} ; i = 1, \dots, n \quad (17.3)$$

mientras que en el espacio de posiciones, este operador sigue siendo simplemente la multiplicación por la variable \mathbf{x}_i . Lo mismo sucede en el espacio de momentos en el que el operador \mathbf{p}_i definido en (17.2) en el espacio de posiciones, actúa simplemente como la multiplicación por la variable independiente \mathbf{p}_i .

Todo lo anterior es claramente valido para una sola partícula que se mueve en n dimensiones. En el caso de un sistema binario, formado por partículas de masas m_1 y m_2 , vimos que la ecuación de Schrödinger esta dada por la expresión (10.2):

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = -\left(\frac{1}{2m_1}\Delta_1 + \frac{1}{2m_2}\Delta_2\right)\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$$

la cual esta escrita en una escala en la cual $\hbar = 1$. Haciendo un re escalamiento a unidades en las cuales $\hbar = 1,0546 \cdot 10^{-34} J \cdot s$ y por la ecuación (10.1) tenemos que la ecuación de Schrödinger para un sistema binario, en estas nuevas unidades, esta dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = H\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$$

con H el operador Hamiltoniano, el cual actúa como:

$$H\psi = H_0\psi + V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\psi \quad (17.4)$$

en donde H_0 es el *Hamiltoniano libre*, el cual esta dado por:

$$H_0\psi = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1\psi - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2\psi \quad (17.5)$$

Δ_1 y Δ_2 denotan al operador Laplaciano, el primero actúa sobre la variable vectorial \mathbf{x}_1 y mientras que el segundo actúa sobre \mathbf{x}_2 . De acuerdo con los conceptos de teoría de dispersión potencial que desarrollamos en el capítulo 14, nos referiremos a H como el *Hamiltoniano perturbado* ya que este si toma en cuenta al potencial V el cual causa la interacción entre las partículas de nuestro sistema binario.

Para estos sistemas, en estas unidades, el operador de evolución esta dado por:

$$V(t) = e^{-i\frac{t}{\hbar}H}$$

En el caso de un sistema binario, el operador de momento en la dirección i para la partícula j ($i = 1, \dots, n$ y $j = 1, 2$) en el espacio de posiciones esta dado por:

$$\mathbf{p}_i^j \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i^j} \psi$$

así también, en estas nuevas unidades introducimos a la *coordenada del centro de masa* \mathbf{X} y a la *coordenada relativa de la posición* \mathbf{x} , tal y como lo hicimos en (10.24):

$$\mathbf{X} = \frac{m_1\mathbf{x}_1 + m_2\mathbf{x}_2}{m_1 + m_2} ; \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \quad (17.6)$$

en analogía con los sistemas clásicos de dispersión [17] y por la regla de substitución.

Como vimos en el capítulo 10, con estas coordenadas podemos factorizar al espacio de Hilbert del sistema compuesto como:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{cm} \otimes \mathcal{H}_{rel}$$

y en este caso con $\mathcal{H}_{cm} = \mathcal{H}_{rel} = \mathbb{R}^n$, en donde \mathcal{H}_{cm} y \mathcal{H}_{rel} son los espacio de Hilbert que describen el movimiento del centro de masa y de la coordenada relativa respectivamente.

Vamos a estudiar sistemas dispersores formados por dos partículas sin spin, como los de el capítulo 16, en los que el potencial es una función de la posición relativa $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$. así la ecuación de Schrödinger en la que centraremos nuestra discusión es de la forma:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi &= H\psi = H_0\psi + V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1\psi - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2\psi + V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\psi \end{aligned} \quad (17.7)$$

o haciendo el cambio al sistema de coordenadas (\mathbf{X}, \mathbf{x}) ,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{X}}\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{x}}\psi + V(\mathbf{x})\psi \quad (17.8)$$

cuyas soluciones pueden ser de la forma,

$$\psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}, t) = \Psi(\mathbf{X}, t) \psi_{rel}(\mathbf{x}, t) \quad (17.9)$$

en donde:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{X}}\Psi$$

y

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} \psi_{rel} + V(\mathbf{x}) \psi_{rel} \quad (17.10)$$

o por la linealidad de la ecuación (17.8) la solución puede ser cualquier combinación lineal arbitraria de soluciones de la forma (17.9).

De la ecuación (17.10), extraemos las definiciones del Hamiltoniano relativo libre $H_{0,rel}$ y del Hamiltoniano relativo perturbado H_{rel} :

$$H_{0,rel} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}}$$

$$H_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x})$$

de esta forma, podemos referirnos a la ecuación (17.10) como:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{rel} = H_{rel} \psi_{rel} = H_{0,rel} \psi_{rel} + V(\mathbf{x}) \psi_{rel}$$

En las unidades en las que $\hbar = 1,0546 \cdot 10^{-34} J \cdot s$ para un sistema binario en el que las partículas que lo forman se encuentran en \mathbb{R}^n , la transformada de Fourier y su inversa en el sistema de coordenadas $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ están dadas por:

$$\hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \mathcal{F}\psi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{x}_1 + \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{x}_2)} \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \quad (17.11)$$

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \mathcal{F}^{-1}\hat{\psi}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{x}_1 + \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{x}_2)} \hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \quad (17.12)$$

Tomando la interpretación usual de la transformada de Fourier de una función de onda (como una transformación entre el espacio de posiciones y de momentos), podemos observar de las expresiones anteriores que las variables en el espacio de momentos las denotaremos ahora como $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ en lugar de $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$.

En el caso de un sistema binario, el operador de posición en la dirección i para la partícula j ($i = 1, \dots, n$ y $j = 1, 2$) en el espacio de momentos está dado por:

$$x_i^j \hat{\psi} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i^j} \hat{\psi}$$

Tal y como lo hicimos en (16.6), introducimos en el espacio de momentos $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ a las variables:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \quad ; \quad \mathbf{p}_{cm} = \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{M} \quad (17.13)$$

en donde $M = m_1 + m_2$, es la masa total del sistema. así como lo hicimos con las expresiones (16.6) nos referiremos a la variable \mathbf{p}_{cm} como el *momento del centro de masa* y a la variable \mathbf{p} como el momento relativo del sistema. Es fácil ver que esta definición de las variables \mathbf{p}_{cm} y \mathbf{p} es consistente con el hecho de que al tomar la transformada de Fourier de una función de onda de la forma $\Psi(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ lo que se obtiene es una función de la forma $\hat{\psi}(\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p})$ y viceversa. Esto se debe al hecho de que el jacobiano de las transformaciones de coordenadas $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \rightarrow (\mathbf{X}, \mathbf{x})$ y $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \rightarrow (\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p})$ es uno.

Lo anterior quiere decir que las expresiones:

$$\hat{\psi}(\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p}) = \mathcal{F}\psi(\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_{cm} \cdot \mathbf{X} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} \psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}) d\mathbf{X} d\mathbf{x}$$

$$\psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1} \hat{\psi}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_{cm} \cdot \mathbf{X} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} \hat{\psi}(\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p}) d\mathbf{p}_{cm} d\mathbf{p}$$

tienen sentido, en el contexto de los cambios de variables (17.6) y (17.13). De esta forma, tenemos que el espacio de Hilbert de los estados del sistema binario en la representación de momentos se factoriza de la forma:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{cm} \otimes \hat{\mathcal{H}}_{rel} \quad (17.14)$$

con:

$$\hat{\mathcal{H}}_{cm} = \mathcal{F}_{cm} \mathcal{H}_{cm}, \quad \hat{\mathcal{H}}_{rel} = \mathcal{F}_{rel} \mathcal{H}_{rel}$$

en donde introducimos a la transformada de Fourier respecto a la coordenada del centro de masa \mathcal{F}_{cm} y a la transformada de Fourier respecto a la coordenada relativa \mathcal{F}_{rel} , las cuales están dadas por:

$$\mathcal{F}_{cm} \Psi = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_{cm} \cdot \mathbf{X})} \Psi(\mathbf{X}) d\mathbf{X}$$

$$\mathcal{F}_{rel} \psi_{rel} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} \psi_{rel}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

en donde $\Psi \in \mathcal{H}_{cm}$ y $\psi_{rel} \in \mathcal{H}_{rel}$. Respectivamente las transformaciones inversas están dadas por:

$$\mathcal{F}_{cm}^{-1} \hat{\Psi} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_{cm} \cdot \mathbf{X})} \hat{\Psi}(\mathbf{p}_{cm}) d\mathbf{p}_{cm}$$

$$\mathcal{F}_{rel}^{-1} \hat{\psi}_{rel} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} \hat{\psi}_{rel}(\mathbf{p}) d\mathbf{p}$$

en donde $\hat{\Psi} \in \hat{\mathcal{H}}_{cm}$ y $\hat{\psi}_{rel} \in \hat{\mathcal{H}}_{rel}$.

17.2. Espacio de configuración, operadores de onda y el operador de dispersión

Consideremos un sistema de dispersión formado por dos partículas sin spin de masas m_1 y m_2 respectivamente, las cuales están en el espacio \mathbb{R}^3 . Para describir a este sistema utilizaremos el formalismo de la teoría de dispersión dependiente del tiempo, que desarrollamos en las secciones 14 y 15.

En este caso, el espacio de Hilbert de los estados cuánticos del sistema binario en el espacio de posiciones $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ es $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^6)$, el cual por lo visto en la sección 3.1 y por la expresión (10.20), podemos descomponer como $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$. Esta descomposición es natural ya que las dos partículas que forman el sistema son libres de moverse en todo el espacio \mathbb{R}^3 . En este caso, la ecuación de Schrödinger esta dada por (17.7) y en donde consideraremos que el potencial de interacción entre las partículas $V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = V(\mathbf{x})$ es una función real definida en todo el espacio \mathbb{R}^3 , la cual no suponemos que tenga ningún tipo de simetría, por ejemplo simetría del tipo esférica (en cuyo caso $V(\mathbf{x}) = V(|\mathbf{x}|)$) como suele suceder en muchos casos de estudio de sistemas de dispersión potencial.

Haciendo el cambio de coordenadas $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \rightarrow (\mathbf{X}, \mathbf{x})$ dado por (17.6) es claro que $\mathcal{H}_{cm} = \mathcal{H}_{rel} = L^2(\mathbb{R}^3)$ y por tanto seguimos teniendo que $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{cm} \otimes \mathcal{H}_{rel} = L^2(\mathbb{R}^6)$. Mas aun, ya que la transformada

de Fourier es una transformación unitaria de $L^2(\mathbb{R}^3)$ en si mismo, tenemos por la expresión (17.14) que:

$$\hat{\mathcal{H}}_{cm} = \hat{\mathcal{H}}_{rel} = L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}^3)$$

y por tanto, $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{cm} \otimes \hat{\mathcal{H}}_{rel} = L^2(\mathbb{R}^6)$.

Supongamos ahora que el Hamiltoniano del sistema es un operador auto adjunto, tal que nuestra teoría es asintóticamente completa, en el sentido del desarrollo del capítulo 14. De esta forma, la evolución temporal de todo estado de dispersión Ψ del Hamiltoniano perturbado H , puede ser descrita asintóticamente por estados φ_- y φ_+ del Hamiltoniano libre H_0 en el pasado remoto y el futuro distante respectivamente, en el sentido de la expresión (14.2). El estado asintótico entrante φ_- es la condición de Cauchy al tiempo $t = 0$ de la solución de la ecuación de Schrödinger libre entrante, mientras que el estado asintótico de salida φ_+ es la condición de Cauchy al tiempo $t = 0$ de la solución de la ecuación libre de Schrödinger de salida.

Los operadores de onda están dados por:

$$\Omega_{\pm} = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{i\frac{t}{\hbar}H} e^{-i\frac{t}{\hbar}H_0}$$

Cuando la separación entre las partículas de nuestro sistema de dispersión es grande y la interacción entre estas es débil, por la hipótesis asintótica tenemos que la dinámica del sistema se puede aproximar a tiempos en el pasado remoto por:

$$e^{-i\frac{t}{\hbar}H_0}\varphi_-$$

después, cuando la separación de las partículas disminuye de tal forma que la interacción entre estas no puede ser despreciada, la dinámica del sistema esta dada por la solución a la ecuación de Schrödinger $e^{-i\frac{t}{\hbar}H}\Psi$, con el con el Hamiltoniano perturbado H , la cual, como vimos en el capítulo 14, se puede expresar en términos del operador de onda Ω_- y de la solución libre de entrada φ_- como:

$$e^{-i\frac{t}{\hbar}H}\Omega_-\varphi_- \quad (17.15)$$

la cual se aproxima asintóticamente la solución libre entrante cuando $t \rightarrow -\infty$, es decir:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|e^{-i\frac{t}{\hbar}H_0}\varphi_- - e^{-i\frac{t}{\hbar}H}\Omega_-\varphi_-\| = 0$$

Luego de la interacción y la dispersión de las partículas, a tiempos muy grandes en el futuro remoto, la dinámica de sistema puede ser aproximada por la solución libre de salida $e^{-i\frac{t}{\hbar}H_0}\varphi_+$, la cual también se puede expresar en términos de los operadores de onda Ω_{\pm} y de la solución libre entrante:

$$e^{-i\frac{t}{\hbar}H_0}\Omega_+^*O_-\varphi_-$$

la cual también tiene un comportamiento asintótico con la ecuación (17.15) cuando $t \rightarrow \infty$:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|e^{-i\frac{t}{\hbar}H}\Omega_-\varphi_- - e^{-i\frac{t}{\hbar}H_0}\Omega_+^*O_-\varphi_-\| = \lim_{t \rightarrow \infty} \|e^{-i\frac{t}{\hbar}H}\Omega_-\varphi_- - e^{-i\frac{t}{\hbar}H_0}\varphi_+\| = 0$$

El operador de dispersión esta dado tal y como se definió en el capítulo 14:

$$\mathcal{S} = \Omega_+^* \Omega_-$$

Para asegurar la existencia de los operadores de onda, del operador de dispersión, que el Hamiltoniano perturbado H sea un operador auto adjunto y que nuestra teoría sea asintóticamente completa, debemos hacer suposiciones mas concretas acerca del potencial de interacción $V(\mathbf{x})$ que

las que hemos dado hasta ahora. Nuestro objetivo es trabajar en el límite de bajas energías, esto es en el límite en el que $|\mathbf{p}/\hbar| \rightarrow 0$, para una variedad de potenciales *bastante general* mas allá de los que presentan simetría esférica como suele suceder en muchos casos. A continuación damos la suposición sobre el potencial de interacción $V(\mathbf{x})$ que usaremos a partir de este momento en el desarrollo del texto.

Suposición 1:

Condición sobre el potencial de interacción $V(\mathbf{x})$: Para alguna $\beta > 0$, $(1 + |\mathbf{x}|)^\beta V(\mathbf{x})$ es un operador compacto del espacio de Sobolev H^1 al espacio de Sobolev H^{-1} .

†

Los espacios de Sobolev H^1 y H^{-1} están dados por:

$$H^1 = H^{1,2}(\mathbb{R}^n) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid \mathcal{F}^{-1}(1 + |\xi|^2)^{1/2} \mathcal{F}f \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$$

$$H^{-1} = H^{-1,2}(\mathbb{R}^n) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid \mathcal{F}^{-1}(1 + |\xi|^2)^{-1/2} \mathcal{F}f \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$$

En general, los espacios de Sobolev son espacios de Banach bajo una norma definida adecuadamente. En particular los espacios H^1 y H^{-1} resultan ser espacios de Hilbert bajo las normas:

$$\|f\|_{H^1} = \|\mathcal{F}^{-1}(1 + |\xi|^2)^{1/2} \mathcal{F}f\|_{L^2}$$

$$\|f\|_{H^{-1}} = \|\mathcal{F}^{-1}(1 + |\xi|^2)^{-1/2} \mathcal{F}f\|_{L^2}$$

respectivamente.

Para una definición y un estudio formal de las propiedades de los espacios de Sobolev nos referimos a [20].

Para las condiciones que un cierto potencial debe de cumplir para satisfacer la suposición 1 nos referimos a [16] y [21] ya que aquí no trabajaremos con un potencial en particular. Sin embargo podemos decir que el potencial $V(x)$ cumple con la suposición 1, si existen dos constantes $R, C > 0$ tales que:

$$\int_{|\mathbf{x}| \leq R} |V(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} < \infty$$

y

$$|V(\mathbf{x})| \leq C(1 + |\mathbf{x}|^{\beta'})$$

para $|\mathbf{x}| > R$ y para alguna $\beta' > \beta$, en donde β es la misma constante que en la suposición 1.

Bajo la condición anterior, el Hamiltoniano H es un operador auto adjunto [16] y queda definido como la suma de la forma cuadrática de H_0 y V . así también los operadores de onda Ω_\pm existen y sus rangos coinciden con el sub espacio absolutamente continuo de H (ver [10] y [18] para una definición de este espacio), mas aun por la proposición 14.9 el operador de dispersión \mathcal{S} es unitario.

Por la ecuación (16.14) tenemos que en la factorización del espacio de Hilbert de posiciones $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{cm} \otimes \mathcal{H}_{rel}$, el operador de dispersión \mathcal{S} se factoriza como:

$$\mathcal{S} = I_{cm} \otimes \mathcal{S}_{rel}$$

en donde I_{cm} es el operador identidad del espacio de Hilbert $\mathcal{H}_{cm} = L^2(\mathbb{R}^n)$ y \mathcal{S}_{rel} es el operador de dispersión respecto a la coordenada relativa \mathbf{x} , el cual esta dado por:

$$\mathcal{S}_{rel} = \Omega_{+,rel}^* \Omega_{-,rel}$$

los operadores de onda relativos, $\Omega_{\pm,rel}$ están dados como en la ecuación (16.13):

$$\Omega_{\pm,rel} = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} V_{t,rel}^* U_{t,rel} = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{i\frac{t}{\hbar} H_{rel}} e^{-i\frac{t}{\hbar} H_{0,rel}}$$

De forma similar en la factorización $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{cm} \otimes \hat{\mathcal{H}}_{rel}$ del espacio de momentos, tenemos que el operador de dispersión $\hat{\mathcal{S}}$, se factoriza como:

$$\hat{\mathcal{S}} = I_{cm} \otimes \hat{\mathcal{S}}_{rel}$$

en donde $\hat{\mathcal{S}}_{rel}$ es el operador de dispersión respecto al momento relativo \mathbf{p} el cual esta dado por la ecuación (16.15). Mas aun, por la teoría que desarrollamos en los capitulos 15 y 16, podemos dar una representación espectral de este operador para obtener entonces la matriz de dispersión, tal y como lo hicimos en la expresión (17.16) en la unidades en las que $\hbar = 1$, pero ya que este es un factor constante, podemos escribir a la matriz de dispersión en el espacio de momento relativo como:

$$\hat{\mathcal{S}}_{rel} = \{\mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2\mu)\} \quad (17.16)$$

en donde $\mathcal{S}(E)$ es un operador unitario en el espacio de Hilbert $L^2(S^2)$ para cada $E \in (0, \infty)$.

Como hemos mencionado, nuestro objetivo es dar una expresión para la pureza de un sistema dispersor en el limite de bajas energías. Esto lo haremos bajo las condiciones del siguiente teorema, el cual da una expansión de la matriz de dispersión (17.16) en el limite cuando $|\mathbf{p}/\hbar| \rightarrow 0$. Este teorema fue probado por Kato y Jensen en el articulo [16] para el caso particular en el que $\hbar = 1$ y $m = 1/2$, pero el caso general se obtiene fácilmente a través de un argumento que desarrollamos en el apéndice de este texto.

Antes de enunciar el teorema definimos a la *longitud de dispersión* como:

$$c_0 = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} V \left(1 + G_0 \frac{2m}{\hbar^2} V \right)^{-1} 1, 1 \right) \quad (17.17)$$

en donde (\cdot, \cdot) denota (a partir de este momento a menos que se indique lo contrario) al producto escalar del espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$, 1 denota a la función idénticamente uno y G_0 es el operador integral cuyo núcleo esta dado por la función de Green a energía cero:

$$G_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{4\pi|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}, \quad \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$$

así también definimos:

$$Y_0(\nu) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad \nu \in S^2 \quad (17.18)$$

y

$$Y_1(\nu) = \frac{1}{4\pi^{3/2}} \left(\frac{2m}{\hbar^2} V \left(1 + G_0 \frac{2m}{\hbar^2} V \right)^{-1} 1, \mathbf{x} \cdot \nu \right), \quad \nu \in S^2 \quad (17.19)$$

como siempre denotamos por $\mathcal{B}(L^2(S^2))$ al espacio de Banach de todos los operadores lineales en el espacio de Hilbert $L^2(S^2)$.

Teorema 1: Expansión de la matriz de dispersión en el limite de bajas energías (Kato y Jensen): Sea $V(\mathbf{x})$ un potencial que cumple con la suposición 1. Supongamos que en cero el Hamiltoniano H_{rel} no tiene *resonancias* o *valores propios*. Entonces si $\beta > 5$, en la norma de $\mathcal{B}(L^2(S^2))$ para $|\mathbf{p}/\hbar| \rightarrow 0$, tenemos la expansión:

$$\mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2\mu) = I + i|\mathbf{p}/\hbar|\Sigma_1^0 - |\mathbf{p}/\hbar|^2\Sigma_2^0 + o(|\mathbf{p}/\hbar|^2) \quad (17.20)$$

en donde I denota al operador identidad de $L^2(S^2)$. Los factores Σ_1^0 y Σ_2^0 , son operadores de rango finito y están dados por:

$$\Sigma_1^0 = -2c_0(\cdot, Y_0)Y_0 \quad (17.21)$$

y

$$\Sigma_2^0 = 2c_0^2(\cdot, Y_0)Y_0 + (\cdot, Y_1)Y_0 - (\cdot, Y_0)Y_1 \quad (17.22)$$

mas aun, si $\beta > 7$, $o(|\mathbf{p}/\hbar|^2)$ se puede remplazar por $O(|\mathbf{p}/\hbar|^3)$.

†

Una resonancia a energía cero del Hamiltoniano H_{rel} es una solución de la ecuación $H_{rel}\psi = 0$, que decae cuando su argumento tiende a infinito, pero que no pertenece a $L^2(\mathbb{R}^3)$. Para una definición precisa nos referimos a [16]. Por lo anterior y suponiendo que cero no es un valor propio de este mismo Hamiltoniano, que la inversa del operador $(1 + G_0 \frac{2m}{\hbar^2})$ existe sin ninguna ambigüedad en la definición (17.17) de la longitud de dispersión c_0 .

Con la expansión de la matriz de dispersión que da el teorema de Kato - Jensen, para un estado inicial de un sistema dispersor de dos partículas, el cual satisface la ecuación libre de Schrödinger, obtendremos el estado libre final (en el sentido del capítulo 14) al cual le calcularemos la pureza (en el sentido del capítulo 12). Todo esto lo haremos en el espacio de momentos y mas precisamente en las variables del momento del centro de masa \mathbf{p}_{cm} y del momento relativo \mathbf{p} .

Si $\varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \in L^2(\mathbb{R}^6)$ es un estado puro de un sistema de dos partículas en la representación del espacio de momentos, su pureza $P(\varphi)$ esta dada por la expresión (12.24), a saber:

$$P(\varphi) = \int_{\mathbb{R}^{12}} \varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \varphi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) \overline{\varphi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2)} \overline{\varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2)} d\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}'_1 \mathbf{p}'_2$$

ya que el Jacobiano de la transformación $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \rightarrow (\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p})$ es uno, si expresamos al estado del sistema de dos partículas como $\varphi(\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p})$, el calculo de la pureza de este ultimo en términos de estas coordenadas tiene la misma forma que la expresión (12.24):

$$P(\varphi) = \int_{\mathbb{R}^{12}} \varphi(\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p}) \varphi(\mathbf{p}'_{cm}, \mathbf{p}') \overline{\varphi(\mathbf{p}'_{cm}, \mathbf{p})} \overline{\varphi(\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p}')} d\mathbf{p}_{cm} \mathbf{p} \mathbf{p}'_{cm} \mathbf{p}'$$

como vimos en el capítulo 12, la pureza $P(\varphi)$ de un estado cuántico normalizado φ , es una medida del entrelazamiento que existe en este estado. Sabemos que para un estado no entrelazado (o separable) la pureza es siempre igual a 1, mientras que para estados no separables es un numero en el intervalo $(0, 1)$.

Parte II

Entrelazamiento cuántico en procesos de dispersión a bajas energías

Capítulo 18

Creación de entrelazamiento

Consideremos un estado asintótico incidente el cual es el producto de dos gaussianas normalizadas en el sistema de referencia del laboratorio:

$$\varphi_{in,\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \varphi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_1) \varphi_{-\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_2) \quad (18.1)$$

En donde

$$\varphi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_1) = \frac{1}{(\sigma^2\pi)^{3/4}} e^{-|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|^2/2\sigma^2}, \quad \mathbf{p}_1 \in \mathbb{R}^3 \quad (18.2)$$

$$\varphi_{-\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_2) = \frac{1}{(\sigma^2\pi)^{3/4}} e^{-|\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_0|^2/2\sigma^2}, \quad \mathbf{p}_2 \in \mathbb{R}^3 \quad (18.3)$$

En el estado (18.1) las partículas uno y dos tienen momento promedio \mathbf{p}_0 y $-\mathbf{p}_0$ respectivamente, siendo σ la varianza de la distribución de momento de ambas.

Asumimos que la dispersión de las partículas tiene lugar en el origen del sistema de referencia del laboratorio al tiempo cero, por esta razón en el estado (18.1) la posición promedio de ambas partículas es cero. Para observar esto último escribamos:

$$\mathbf{p}_0 = (p_{0,1}, p_{0,2}, p_{0,3}); \quad \mathbf{p}_1 = (p_{1,1}, p_{1,2}, p_{1,3}); \quad \mathbf{p}_2 = (p_{2,1}, p_{2,2}, p_{2,3})$$

y sean

$$\mathbf{x}_1 = (x_{1,1}, x_{1,2}, x_{1,3})$$

$$\mathbf{x}_2 = (x_{2,1}, x_{2,2}, x_{2,3})$$

Los vectores de posición de las partículas uno y dos respectivamente. Luego la posición promedio de la primera partícula en la coordenada $x_{1,j}$ ($j = 1, 2, 3$) esta dada por:

$$\begin{aligned} \langle x_{1,j} \rangle &= \left(\varphi_{in,\mathbf{p}_0}, i\hbar \frac{\partial \varphi_{in,\mathbf{p}_0}}{\partial p_{1,j}} \right)_{L^2(\mathbb{R}^6)} = i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_{in,\mathbf{p}_0} \cdot \frac{\partial \varphi_{in,\mathbf{p}_0}}{\partial p_{1,j}} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \\ &= \frac{i\hbar}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|^2 - |\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_0|^2}{\sigma^2}\right) \frac{\partial}{\partial p_{1,j}} \left(-\frac{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|^2}{2\sigma^2}\right) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \\ &= -\frac{i\hbar}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|^2 - |\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_0|^2}{\sigma^2}\right) \frac{\partial}{\partial p_{1,j}} \left(\frac{(p_{1,j} - p_{0,j})^2}{2\sigma^2}\right) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \\ &= -\frac{i\hbar}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|^2 - |\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_0|^2}{\sigma^2}\right) \left(\frac{p_{1,j} - p_{0,j}}{\sigma^2}\right) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \end{aligned}$$

$$= -\frac{i\hbar}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(-\frac{|\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_0|^2}{\sigma^2}\right) d\mathbf{p}_2 \cdot \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{(p_{1,i} - p_{0,i})^2}{\sigma^2}\right) dp_{1,i} \cdot \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{(p_{1,k} - p_{0,k})^2}{\sigma^2}\right) dp_{1,k} \\ \cdot \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{(p_{1,j} - p_{0,j})^2}{\sigma^2}\right) \left(\frac{p_{1,j} - p_{0,j}}{\sigma^2}\right) dp_{1,j}$$

Donde $i, k \neq j$.

Haciendo el cambio de variable $p = p_{1,j} - p_{0,j}$ en la integral del extremo derecho de la última ecuación se tiene que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(p_{1,j} - p_{0,j})^2}{\sigma^2}\right) \left(\frac{p_{1,j} - p_{0,j}}{\sigma^2}\right) dp_{1,j} = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{p^2}{\sigma^2}\right) \left(\frac{p}{\sigma^2}\right) dp = 0$$

ya que, $\exp\left(-\frac{p^2}{\sigma^2}\right) \left(\frac{p}{\sigma^2}\right)$ es una función impar. Por tanto, $\langle x_{i,j} \rangle = 0$ para $j = 1, 2, 3$ y podemos concluir que, $\langle \mathbf{x}_1 \rangle = 0$.

De forma similar obtenemos que la posición promedio de la segunda partícula en la coordenada $x_{2,j}$ $j = 1, 2, 3$ está dada por:

$$\langle x_{2,j} \rangle = \left(\varphi_{in, \mathbf{p}_0}, i\hbar \frac{\partial \varphi_{in, \mathbf{p}_0}}{\partial p_{2,j}} \right)_{L^2(\mathbb{R}^6)}$$

$$= -\frac{i\hbar}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(-\frac{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|^2}{\sigma^2}\right) d\mathbf{p}_1 \cdot \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{(p_{2,i} + p_{0,i})^2}{\sigma^2}\right) dp_{2,i} \cdot \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{(p_{2,k} + p_{0,k})^2}{\sigma^2}\right) dp_{2,k} \\ \cdot \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{(p_{2,j} + p_{0,j})^2}{\sigma^2}\right) \left(\frac{p_{2,j} + p_{0,j}}{\sigma^2}\right) dp_{2,j}$$

Haciendo el cambio de variable $p = p_{2,j} + p_{0,j}$ en la integral del extremo derecho de la última ecuación se tiene que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(p_{2,j} + p_{0,j})^2}{\sigma^2}\right) \left(\frac{p_{2,j} + p_{0,j}}{\sigma^2}\right) dp_{2,j} = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{p^2}{\sigma^2}\right) \left(\frac{p}{\sigma^2}\right) dp = 0$$

Por tanto $\langle x_{2,j} \rangle = 0$ para $j = 1, 2, 3$ y podemos concluir que $\langle \mathbf{x}_2 \rangle = 0$.

Otra cantidad de interés que se puede obtener del estado (18.1) es el promedio del momento relativo $\mathbf{p} = \mu_2 \mathbf{p}_1 - \mu_1 \mathbf{p}_2$; así el valor promedio de la coordenada $p_j = \mu_2 p_{1,j} - \mu_1 p_{2,j}$ ($j = 1, 2, 3$) del momento relativo está dado por,

$$\langle p_j \rangle = (\varphi_{in, \mathbf{p}_0}, p_j \varphi_{in, \mathbf{p}_0})_{L^2(\mathbb{R}^6)} = \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} p_j \cdot \exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|^2 - |\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_0|^2}{\sigma^2}\right) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \\ = \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_0|^2}{\sigma^2}\right) d\mathbf{p}_2 \cdot \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|^2}{\sigma^2}\right) \cdot (\mu_2 p_{1,j}) d\mathbf{p}_1 \\ - \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|^2}{\sigma^2}\right) d\mathbf{p}_1 \cdot \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_0|^2}{\sigma^2}\right) \cdot (\mu_1 p_{2,j}) d\mathbf{p}_2 \\ = \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} ((\sigma^3\pi^{3/2})^2 \cdot \mu_2 p_{0,j}) + \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} ((\sigma^3\pi^{3/2})^2 \cdot \mu_1 p_{0,j}) = (\mu_2 + \mu_1) p_{0,j} = p_{0,j}$$

Por tanto, podemos concluir que $\langle \mathbf{p} \rangle = \mathbf{p}_0$.

Hay que notar que para trabajar en el régimen de bajas energías, es necesario que el promedio del momento relativo, $\langle \mathbf{p} \rangle = \mathbf{p}_0$ y la varianza de la distribución σ , tengan un valor pequeño, ya que si σ tiene un valor grande el estado asintótico inicial $\varphi_{in, \mathbf{p}_0}$ va a tener una gran probabilidad de tener un momento muy grande, no importando que el promedio del momento relativo sea muy pequeño.

Ya que $\varphi_{in, \mathbf{p}_0}$ es un estado producto, su pureza es uno,

$$P(\varphi_{in, \mathbf{p}_0}) = 1 \quad (18.4)$$

Una vez que el proceso de dispersión termina, las partículas están en el estado asintótico de salida $\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$ dado por,

$$\varphi_{out, \mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = (\mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in, \mathbf{p}_0})(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \quad (18.5)$$

Ya que el momento relativo \mathbf{p} depende tanto de \mathbf{p}_1 como de \mathbf{p}_2 , $\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$ ya no es un estado producto y por tanto tiene una pureza menor que uno, lo cual indica que las partículas se han entrelazado cuánticamente debido al proceso de dispersión.

A continuación introducimos alguna de la notación que usaremos en el cálculo del pureza del estado $\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$.

Denotamos por φ_{in} al estado asintótico inicial con momento relativo promedio cero,

$$\varphi_{in}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \varphi(\mathbf{p}_1) \varphi(\mathbf{p}_2) \quad (18.6)$$

En donde,

$$\varphi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(\sigma^2\pi)^{3/4}} e^{-\mathbf{p}^2/2\sigma^2}, \quad \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3 \quad (18.7)$$

y denotaremos por φ_{out} al estado asintótico de salida con estado asintótico de entrada φ_{in} ,

$$\varphi_{out}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = (\mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in})(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \quad (18.8)$$

También definimos,

$$\psi_{\mathbf{q}_0}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(\pi)^{3/4}} e^{-|\mathbf{q}-\mathbf{q}_0|^2/2}, \quad \mathbf{q} \in \mathbb{R}^3 \quad (18.9)$$

$$\psi(\mathbf{q}) = \frac{1}{(\pi)^{3/4}} e^{-\mathbf{q}^2/2}, \quad \mathbf{q} \in \mathbb{R}^3 \quad (18.10)$$

$$\psi_{in, \mathbf{q}_0}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \psi_{\mathbf{q}_0}(\mathbf{q}_1) \psi_{-\mathbf{q}_0}(\mathbf{q}_2) \quad (18.11)$$

$$\psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \psi(\mathbf{q}_1) \psi(\mathbf{q}_2) \quad (18.12)$$

Notamos que,

$$\|\psi_{\mathbf{q}_0}\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 = \frac{1}{(\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-|\mathbf{q}-\mathbf{q}_0|^2} d\mathbf{q} = 1 \quad (18.13)$$

$$\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 = \frac{1}{(\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\mathbf{q}^2} d\mathbf{q} = 1 \quad (18.14)$$

y por tanto,

$$\|\psi_{in, \mathbf{q}_0}\| = 1 \quad (18.15a)$$

$$\|\psi_{in}\| = 1 \quad (18.15b)$$

En las siguientes proposiciones establecemos un par de resultados que utilizaremos en el cálculo del pureza del estado $\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$.

Proposición 18.1.

$$\|\varphi_{in, \mathbf{p}_0} - \varphi_{in}\| \leq C \min \left\{ \frac{|\mathbf{p}_0|}{\sigma}, 1 \right\} \quad (18.16)$$

$$\|\mathbf{p}(\varphi_{in, \mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| \leq C |\mathbf{p}_0| \quad (18.17)$$

Demostración

Denotamos por $\mathbf{q}_i = \mathbf{p}_i/\sigma$, $i = 0, 1, 2$. Luego observamos que,

$$\begin{aligned} \|\varphi_{in, \mathbf{p}_0} - \varphi_{in}\|^2 &= \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|^2 - |\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_0|^2}{2\sigma^2}\right) - \exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_1|^2 - |\mathbf{p}_2|^2}{2\sigma^2}\right) \right]^2 d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \\ &= \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\exp\left(\frac{-|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0|^2 - |\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_0|^2}{2}\right) - \exp\left(\frac{-|\mathbf{q}_1|^2 - |\mathbf{q}_2|^2}{2}\right) \right]^2 \sigma^3 d\mathbf{q}_1 \sigma^3 d\mathbf{q}_2 \\ &= \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\exp\left(\frac{-|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0|^2 - |\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_0|^2}{2}\right) - \exp\left(\frac{-|\mathbf{q}_1|^2 - |\mathbf{q}_2|^2}{2}\right) \right]^2 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 = \|\psi_{in, \mathbf{q}_0} - \psi_{in}\|^2 \end{aligned}$$

Por tanto,

$$\|\varphi_{in, \mathbf{p}_0} - \varphi_{in}\| = \|\psi_{in, \mathbf{q}_0} - \psi_{in}\| \quad (18.18)$$

Primero para $|\mathbf{q}_0| \leq 1$ se tiene,

$$\psi_{in, \mathbf{q}_0} - \psi_{in} = \frac{1}{\pi^{3/2}} e^{-(|\mathbf{q}_1|^2 + |\mathbf{q}_2|^2)/2} \left[e^{-|\mathbf{q}_0|^2 + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{q}_0} - 1 \right] \quad (18.19)$$

Por la desigualdad de Schwars y la desigualdad de Minkowski tenemos que,

$$\begin{aligned} -|\mathbf{q}_0|^2 + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{q}_0 &\leq |\mathbf{q}_0|^2 + |\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2| |\mathbf{q}_0| \\ &\leq |\mathbf{q}_0|^2 + (|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|) |\mathbf{q}_0| \end{aligned}$$

Así podemos escribir,

$$\left| e^{-|\mathbf{q}_0|^2 + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{q}_0} - 1 \right| = \left| \int_0^{-|\mathbf{q}_0|^2 + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{q}_0} e^s ds \right| \quad (18.20)$$

$$\leq \left| \int_0^{|\mathbf{q}_0|^2 + (|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|) |\mathbf{q}_0|} e^s ds \right|$$

$$\leq e^{|\mathbf{q}_0|^2 + (|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|) |\mathbf{q}_0|} (|\mathbf{q}_0|^2 + (|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|) |\mathbf{q}_0|) \quad (18.21)$$

Por las ecuaciones (18.19), (18.20) y (18.21) se tiene que

$$\begin{aligned} \|\psi_{in, \mathbf{q}_0} - \psi_{in}\|^2 &= \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-(|\mathbf{q}_1|^2 + |\mathbf{q}_2|^2)} \left[e^{-|\mathbf{q}_0|^2 + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{q}_0} - 1 \right]^2 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \\ &\leq \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-(|\mathbf{q}_1|^2 + |\mathbf{q}_2|^2)} e^{2|\mathbf{q}_0|^2 + 2(|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|) |\mathbf{q}_0|} (|\mathbf{q}_0|^2 + (|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|) |\mathbf{q}_0|)^2 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \\ &= |\mathbf{q}_0|^2 \cdot \left[\frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-(|\mathbf{q}_1|^2 + |\mathbf{q}_2|^2)} e^{2|\mathbf{q}_0|^2 + 2(|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|) |\mathbf{q}_0|} (|\mathbf{q}_0| + (|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|)) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \right] \end{aligned}$$

Se observa que el miembro derecho de la ultima igualdad es una constante real y por tanto,

$$\|\psi_{in,\mathbf{q}_0} - \psi_{in}\| \leq C |\mathbf{q}_0|$$

Por (18.18) y la definición de \mathbf{q}_0 concluimos que para $|\mathbf{p}_0| \leq 1$,

$$\|\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in}\| \leq C \frac{|\mathbf{p}_0|}{\sigma}$$

Ahora supongamos $1 \leq |\mathbf{q}_0|$. Por la desigualdad de Schwars se tiene que,

$$\|\psi_{in,\mathbf{q}_0} - \psi_{in}\| \leq \|\psi_{in,\mathbf{q}_0}\| + \|\psi_{in}\| = 2 \leq C \cdot 1 \leq C |\mathbf{q}_0|$$

Por lo anterior concluimos que (18.16) se cumple.

Denotamos por $\mathbf{q} = \mathbf{p}/\sigma$ y notamos,

$$|\mathbf{q}| = |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \leq |\mu_2 \mathbf{q}_1| + |\mu_1 \mathbf{q}_2| \leq |\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2| \quad (18.22)$$

Luego se tiene que,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{p}(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\|^2 &= \\ &= \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{p}|^2 \left[\exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|^2 - |\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_0|^2}{2\sigma^2}\right) - \exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_1|^2 - |\mathbf{p}_2|^2}{2\sigma^2}\right) \right]^2 d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \\ &= \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \sigma^2 |\mathbf{q}|^2 \left[\exp\left(\frac{-|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0|^2 - |\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_0|^2}{2}\right) - \exp\left(\frac{-|\mathbf{q}_1|^2 - |\mathbf{q}_2|^2}{2}\right) \right]^2 \sigma^3 d\mathbf{q}_1 \sigma^3 d\mathbf{q}_2 \\ &= \frac{\sigma^2}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{q}|^2 \left[\exp\left(\frac{-|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0|^2 - |\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_0|^2}{2}\right) - \exp\left(\frac{-|\mathbf{q}_1|^2 - |\mathbf{q}_2|^2}{2}\right) \right]^2 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \\ &= \sigma^2 \|\mathbf{q}(\psi_{in,\mathbf{q}_0} - \psi_{in})\|^2 \end{aligned}$$

por tanto,

$$\|\mathbf{p}(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| = \sigma \|\mathbf{q}(\psi_{in,\mathbf{q}_0} - \psi_{in})\| \quad (18.23)$$

Primero para $|\mathbf{q}_0| \leq 1$ tenemos,

$$|\mathbf{q}(\psi_{in,\mathbf{q}_0} - \psi_{in})| = |\mathbf{q}| \cdot \frac{1}{\pi^{3/2}} e^{-(|\mathbf{q}_1|^2 + |\mathbf{q}_2|^2)/2} \left[e^{-|\mathbf{q}_0|^2 + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{q}_0} - 1 \right] \quad (18.24)$$

Luego por las ecuaciones (18.20), (18.21),(18.22) y (18.24),

$$\begin{aligned} \|\mathbf{q}(\psi_{in,\mathbf{q}_0} - \psi_{in})\|^2 &= \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{q}|^2 e^{-(|\mathbf{q}_1|^2 + |\mathbf{q}_2|^2)} \left[e^{-|\mathbf{q}_0|^2 + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{q}_0} - 1 \right]^2 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \\ &\leq \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} (|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|)^2 e^{-(|\mathbf{q}_1|^2 + |\mathbf{q}_2|^2)} e^{2|\mathbf{q}_0|^2 + 2(|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|)|\mathbf{q}_0|} (|\mathbf{q}_0|^2 + (|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|)|\mathbf{q}_0|)^2 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \\ &= |\mathbf{q}_0|^2 \left[\frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} (|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|)^2 e^{-(|\mathbf{q}_1|^2 + |\mathbf{q}_2|^2)} e^{2|\mathbf{q}_0|^2 + 2(|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|)|\mathbf{q}_0|} (|\mathbf{q}_0| + (|\mathbf{q}_1| + |\mathbf{q}_2|)|\mathbf{q}_0|)^2 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \right] \end{aligned}$$

De nuevo, el miembro derecho de la ultima igualdad es una constante real y por tanto,

$$\|\mathbf{q}(\psi_{in,\mathbf{q}_0} - \psi_{in})\| \leq C |\mathbf{q}_0|$$

Por (18.23) y la definición de \mathbf{q}_0 concluimos que para $|\mathbf{p}_0| \leq 1$,

$$\|\mathbf{p}(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| \leq C |\mathbf{p}_0|.$$

Ahora supongamos que $1 \leq |\mathbf{q}_0|$ y observamos que esto implica, $\sigma \leq |\mathbf{p}_0|$. Por (18.22) y la definición de \mathbf{q} es claro que,

$$|\mathbf{p}| \leq |\mathbf{p}_1| + |\mathbf{p}_2| \quad (18.25)$$

Así por (18.25) y la desigualdad de Minkowski tenemos:

$$\|\mathbf{p}(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| \leq \|\mathbf{p}_1(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| + \|\mathbf{p}_2(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| \quad (18.26)$$

Luego para $\|\mathbf{p}_1(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\|$ tenemos que:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{p}_1(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| &= \|(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_0)(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| \leq \|(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_0)\varphi_{in,\mathbf{p}_0}\| + \|\mathbf{p}_1\varphi_{in}\| \\ &\leq |\mathbf{p}_0| \cdot \|\varphi_{in,\mathbf{p}_0}\| + \|(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0)\varphi_{in,\mathbf{p}_0}\| + \|\mathbf{p}_1\varphi_{in}\| = |\mathbf{p}_0| + \|(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0)\varphi_{in,\mathbf{p}_0}\| + \|\mathbf{p}_1\varphi_{in}\| \end{aligned} \quad (18.27)$$

Ahora observamos que:

$$\begin{aligned} \|(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0)\varphi_{in,\mathbf{p}_0}\|^2 &= \\ &= \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} (|\mathbf{p}_1| - |\mathbf{p}_0|)^2 \left[\exp\left(\frac{-|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|^2 - |\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_0|^2}{2\sigma^2}\right) \right]^2 d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \\ &= \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \sigma^2 (|\mathbf{q}_1| - |\mathbf{q}_0|)^2 \left[\exp\left(\frac{-|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0|^2 - |\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_0|^2}{2}\right) \right]^2 \sigma^3 d\mathbf{q}_1 \sigma^3 d\mathbf{q}_2 \\ &= \frac{\sigma^2}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} (|\mathbf{q}_1| - |\mathbf{q}_0|)^2 \left[\exp\left(\frac{-|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0|^2 - |\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_0|^2}{2}\right) \right]^2 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \\ &= \sigma^2 \|(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0)(\psi_{in,\mathbf{q}_0} - \psi_{in})\|^2 \end{aligned}$$

Por lo anterior y ya que $\sigma \leq |\mathbf{p}_0|$ tenemos que,

$$\|(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0)\varphi_{in,\mathbf{p}_0}\| = \sigma \|(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0)(\psi_{in,\mathbf{q}_0} - \psi_{in})\| \leq |\mathbf{p}_0| \cdot \|(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0)(\psi_{in,\mathbf{q}_0} - \psi_{in})\| \quad (18.28)$$

$$\|\mathbf{p}_1\varphi_{in,\mathbf{p}_0}\| = \sigma \|\mathbf{q}_1(\psi_{in,\mathbf{q}_0} - \psi_{in})\| \leq |\mathbf{p}_0| \cdot \|\mathbf{q}_1(\psi_{in,\mathbf{q}_0} - \psi_{in})\| \quad (18.29)$$

En donde (18.29) se obtuvo de manera similar a (18.28).

Luego por (18.28) y (18.29),

$$\|\mathbf{p}_1(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| \leq C |\mathbf{p}_0|$$

y de manera similar se tiene que,

$$\|\mathbf{p}_2(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| \leq C |\mathbf{p}_0|$$

Así por (18.26) concluimos que para $1 \leq |\mathbf{q}_0|$,

$$\|\mathbf{p}(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| \leq C |\mathbf{p}_0|$$

y por tanto (18.17) se cumple. □

Proposición 18.2. *Sea:*

$$\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m) = \mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2m) - I \quad (18.30)$$

Donde I denota al operador identidad en $L^2(\mathbb{S}^2)$. Entonces en la norma de $\mathcal{B}(L^2(\mathbb{S}^2))$ se tiene que,

$$\|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\|_{\mathcal{B}(L^2(\mathbb{S}^2))} \leq C \frac{|\mathbf{p}/\hbar|}{1 + |\mathbf{p}/\hbar|} \quad (18.31)$$

Demostración

A lo largo de esta demostración denotaremos por $\|\cdot\|$ a la norma de $\mathcal{B}(L^2(\mathbb{S}^2))$.

Tomando el hecho de que $\|\mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2m)\| = 1$, observamos que para todo valor de \mathbf{p}^2 se tiene:

$$\|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\| = \|\mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2m) - I\| \leq \|\mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2m)\| + \|I\| = 2. \quad (18.32)$$

Por otra parte, el teorema de *Kato – Jensen* nos dice que en el límite cuando $|\frac{\mathbf{p}}{\hbar}| \rightarrow 0$ podemos escribir:

$$\begin{aligned} \|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\| &= \left\| i \left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right| \Sigma_1^0 - \left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right|^2 \Sigma_2^0 \right\| \\ &\leq \left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right| \cdot \|\Sigma_1^0\| + \left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right|^2 \|\Sigma_2^0\| \end{aligned}$$

Observamos que la derivada respecto a $|\mathbf{p}/\hbar|$ del último miembro de la expresión anterior es,

$$\|\Sigma_1^0\| + 2 \left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right| \|\Sigma_2^0\|$$

Cuyo valor en $|\mathbf{p}| = 0$ es $\|\Sigma_1^0\|$; Por tanto si C_1 es una constante real tal que $\|\Sigma_1^0\| < C_1$ y ya que estamos en el límite $|\frac{\mathbf{p}}{\hbar}| \rightarrow 0$, concluimos que:

$$\|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\| \leq C_1 \left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right| ; \left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right| \rightarrow 0 \quad (18.33)$$

Por otro lado supongamos que $1 \leq |\frac{\mathbf{p}}{\hbar}|$; Entonces en este caso se tiene:

$$\frac{1}{2} \leq \frac{|\mathbf{p}/\hbar|}{1 + |\mathbf{p}/\hbar|} < 1$$

Luego por (18.32) y escogiendo una constante real C_2 lo suficientemente grande, a saber $4 < C_2$, tenemos que:

$$\|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\| \leq C_2 \frac{|\mathbf{p}/\hbar|}{1 + |\mathbf{p}/\hbar|}$$

Luego, tomando una constante real C tal que, $C > \max\{C_1, C_2\}$, concluimos que (18.31) se cumple. \square

Ahora, como una consecuencia de la proposición anterior, calcularemos una cota superior para $\|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}\|$.

Ya que $\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)$ es un operador de $L^2(\mathcal{S}^2)_{rel}$ es conveniente hacer el cambio de variable $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \rightarrow (\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p})$, así tenemos que:

$$\begin{aligned} \|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}\|^2 &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}(\mathbf{p}_{cm}, \mathbf{p})|^2 d\mathbf{p} d\mathbf{p}_{cm} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \int_{\mathcal{S}^2} |\mathcal{T}(p^2/2m)\varphi_{in}|^2 p^2 \text{sen}(\theta) d\theta d\phi dp d\mathbf{p}_{cm} \end{aligned}$$

En donde en la última igualdad se realizó el cambio a coordenadas esféricas, $\mathbf{p} \rightarrow (p, \theta, \phi)$. Se observa que:

$$\int_{S^2} |\mathcal{T}(p^2/2m)\varphi_{in}|^2 \sin(\theta) d\theta d\phi = \|\mathcal{T}(p^2/2m)\varphi_{in}\|_{L^2(S^2)}^2$$

Luego por (18.31) tenemos que,

$$\begin{aligned} \|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}\|^2 &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \|\mathcal{T}(p^2/2m)\varphi_{in}\|_{L^2(S^2)}^2 p^2 dp d\mathbf{p}_{cm} \\ &\leq C \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \left| \frac{|p/\hbar|}{1 + |p/\hbar|} \right|^2 \|\varphi_{in}\|_{L^2(S^2)}^2 p^2 dp d\mathbf{p}_{cm} \leq C \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \left| \frac{p}{\hbar} \right|^2 \|\varphi_{in}\|_{L^2(S^2)}^2 p^2 dp d\mathbf{p}_{cm} \\ &= C \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \| |p/\hbar| \varphi_{in} \|_{L^2(S^2)}^2 p^2 dp d\mathbf{p}_{cm} = C \frac{1}{\hbar^2} \|\mathbf{p} \varphi_{in}\|^2 \end{aligned}$$

Ahora desarrollemos $\|\mathbf{p} \varphi_{in}\|^2$ en las variables $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ para después hacer el cambio, $\mathbf{p}/\sigma \rightarrow \mathbf{q}$ y $\mathbf{p}_{1,2}/\sigma \rightarrow \mathbf{q}_{1,2}$,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{p} \varphi_{in}\|^2 &= \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{p}^2 \exp\left(\frac{-\mathbf{p}_1^2 - \mathbf{p}_2^2}{\sigma^2}\right) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \\ &= \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \sigma^2 \mathbf{q}^2 \exp(-\mathbf{q}_1^2 - \mathbf{q}_2^2) \sigma^3 d\mathbf{q}_1 \sigma^3 d\mathbf{q}_2 = \sigma^2 \cdot \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{q}^2 \exp(-\mathbf{q}_1^2 - \mathbf{q}_2^2) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \\ &= \sigma^2 \|\mathbf{q} \psi_{in}\|^2 \end{aligned}$$

De esta forma, $\|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}\|$ esta acotada superiormente de la siguiente manera,

$$\|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}\| \leq C \frac{\sigma}{\hbar} \|\mathbf{q} \psi_{in}\| \quad (18.34)$$

Denotamos por,

$$\mathcal{L}(\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4) = \int_{\mathbb{R}^{12}} \phi_1(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \overline{\phi_2(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_2)} \phi_3(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) \overline{\phi_4(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_4)} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 d\mathbf{p}_3 d\mathbf{p}_4 \quad (18.35)$$

Notamos que cuando $\phi_1 = \phi_2 = \phi_3 = \phi_4 = \phi$, tenemos que:

$$\mathcal{L}(\phi, \phi, \phi, \phi) = P(\phi)$$

Por la desigualdad de Schwarz en $L^2(\mathbb{R}^{12})$ se tiene que,

$$|\mathcal{L}(\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4)| = \left| (\phi_2\phi_4, \phi_1\phi_3)_{L^2(\mathbb{R}^{12})} \right| \leq \|\phi_2\phi_4\|_{L^2(\mathbb{R}^{12})} \cdot \|\phi_1\phi_3\|_{L^2(\mathbb{R}^{12})} = \prod_{i=1}^4 \|\phi_i\|_{L^2(\mathbb{R}^6)} \quad (18.36)$$

El siguiente teorema es nuestra primera estimación de la pureza para bajas energías.

Teorema 18.3. *Supongamos que la suposición sobre el potencial V se cumple y que en cero H_{rel} no tiene una resonancia o un valor propio. Entonces,*

$$P(\varphi_{out, \mathbf{p}_0}) = P(\varphi_{out}) + O(|\mathbf{p}_0/\hbar|) \quad (18.37)$$

cuando, $|\mathbf{p}_0/\hbar| \rightarrow 0$.

Demostración

Primero notamos que, $\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$ se puede escribir como:

$$\varphi_{out, \mathbf{p}_0} = \mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in, \mathbf{p}_0} = \varphi_{in, \mathbf{p}_0} + (\mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2m) - I)\varphi_{in, \mathbf{p}_0} = \varphi_{in, \mathbf{p}_0} + \mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in, \mathbf{p}_0}$$

Así,

$$P(\varphi_{out, \mathbf{p}_0}) = P(\varphi_{in, \mathbf{p}_0} + \mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in, \mathbf{p}_0})$$

Desarrollando el término derecho de la expresión anterior tenemos por la ecuación (18.4),

$$\begin{aligned} & P(\varphi_{in, \mathbf{p}_0} + \mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in, \mathbf{p}_0}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^{12}} \varphi_{in, \mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \overline{\varphi_{in, \mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_2)} \varphi_{in, \mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) \overline{\varphi_{in, \mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_4)} d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 + \sum_{i=1}^{15} \mathcal{L}_i(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) \\ &= P(\varphi_{in, \mathbf{p}_0}) + \sum_{i=1}^{15} \mathcal{L}_i(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) = 1 + \sum_{i=1}^{15} \mathcal{L}_i(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) \end{aligned}$$

Aquí introducimos $\mathcal{L}_i(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$ que se define en función de (18.35) de la siguiente manera,

$$\mathcal{L}_i(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) := \mathcal{L}(\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) \quad (18.38)$$

en donde k , ($1 \leq k \leq 4$) de las ψ_i son iguales a $\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in, \mathbf{p}_0}$ y las $4 - k$ restantes son iguales a $\varphi_{in, \mathbf{p}_0}$. Definiendo,

$$\mathcal{R}(\mathbf{p}_0) := \sum_{i=1}^{15} \mathcal{L}_i(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) \quad (18.39)$$

Tenemos que,

$$P(\varphi_{out, \mathbf{p}_0}) = 1 + \mathcal{R}(\mathbf{p}_0) \quad (18.40)$$

Por otro lado, ya que φ_{out} es un caso particular de $\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$ cuando $\mathbf{p}_0 = 0$, es claro que la pureza de este estado está dada por,

$$P(\varphi_{out}) = 1 + \mathcal{R}(0) \quad (18.41)$$

En donde,

$$\mathcal{R}(0) := \sum_{i=1}^{15} \mathcal{L}_i(0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) \quad (18.42)$$

Ahora, sin pérdida de generalidad podemos suponer que,

$$\mathcal{L}_1(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) = \mathcal{L}(\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in, \mathbf{p}_0}, \varphi_{in, \mathbf{p}_0}, \varphi_{in, \mathbf{p}_0}, \varphi_{in, \mathbf{p}_0}) \quad (18.43)$$

Haciendo, $\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in,\mathbf{p}_0} = \mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in} + \mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})$ en la ecuación anterior y por (18.35),

$$\mathcal{L}_1(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) =$$

$$\mathcal{L}(\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}) + \mathcal{L}(\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in}), \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}) \quad (18.44)$$

Ahora prestemos atención al segundo términos del lado derecho de la ecuación anterior. Por (18.36) tenemos que,

$$|\mathcal{L}(\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in}), \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0})| \leq$$

$$\|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| \cdot \|\varphi_{in,\mathbf{p}_0}\|^3 = \|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\|$$

Luego por las ecuaciones (18.17) , (18.31) y tomando el hecho de que $|\frac{\mathbf{p}}{\hbar}| \rightarrow 0$, podemos acotar a $\|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\|$ de la siguiente forma,

$$\begin{aligned} \|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\|^2 &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \|\mathcal{T}(p^2/2m)(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\|_{L^2(S^2)}^2 p dp d\mathbf{p}_{cm} \\ &\leq C \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \left|\frac{p}{\hbar}\right|^2 \cdot \|\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in}\|_{L^2(S^2)}^2 p dp d\mathbf{p}_{cm} = C \frac{1}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \|p(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\|_{L^2(S^2)}^2 p dp d\mathbf{p}_{cm} \\ &= C \frac{1}{\hbar^2} \|\mathbf{p}(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\|^2 \leq C \left|\frac{\mathbf{p}_0}{\hbar}\right|^2 \end{aligned}$$

Así tenemos que, $\|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in})\| \leq C |\mathbf{p}_0/\hbar|$. Luego,

$$|\mathcal{L}(\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)(\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in}), \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0})| \leq C \left|\frac{\mathbf{p}_0}{\hbar}\right|$$

Por lo anterior, en el límite cuando $|\frac{\mathbf{p}}{\hbar}| \rightarrow 0$, podemos estimar a \mathcal{L}_1 de la siguiente forma,

$$\mathcal{L}_1(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) = \mathcal{L}(\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}) + O(|\mathbf{p}_0/\hbar|) \quad (18.45)$$

Haciendo $\varphi_{in,\mathbf{p}_0} = (\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in}) + \varphi_{in}$ en la segunda entrada del lado derecho de la ecuación (18.45) tenemos por (18.35),

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_1(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) &= \mathcal{L}(\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}, (\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in}), \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}) \\ &\quad + \mathcal{L}(\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}, \varphi_{in}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}) + O(|\mathbf{p}_0/\hbar|) \end{aligned} \quad (18.46)$$

Ahora prestemos atención al termino $\mathcal{L}(\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}, (\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in}), \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0})$ de la ecuación anterior. Por las ecuaciones (18.16) , (18.34) y (18.36) tenemos que,

$$\begin{aligned} |\mathcal{L}(\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}, (\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in}), \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0})| &\leq \|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}\| \cdot \|\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in}\| \cdot \|\varphi_{in,\mathbf{p}_0}\|^2 \\ &= \|\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}\| \cdot \|\varphi_{in,\mathbf{p}_0} - \varphi_{in}\| \leq C \frac{\sigma}{\hbar} \|\mathbf{q}\psi_{in}\| \cdot \left|\frac{\mathbf{p}_0}{\sigma}\right| \leq C \left|\frac{\mathbf{p}_0}{\hbar}\right| \end{aligned}$$

Así, en el límite cuando $|\frac{\mathbf{p}}{\hbar}| \rightarrow 0$, podemos estimar a \mathcal{L}_1 de la siguiente forma,

$$\mathcal{L}_1(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) = \mathcal{L}(\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}, \varphi_{in}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}, \varphi_{in,\mathbf{p}_0}) + O(|\mathbf{p}_0/\hbar|) \quad (18.47)$$

Repitiendo este proceso dos veces más, concluimos que para $|\frac{\mathbf{p}}{\hbar}| \rightarrow 0$, podemos estimar a \mathcal{L}_1 como:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_1(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) &= \mathcal{L}(\mathcal{T}(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}, \varphi_{in}, \varphi_{in}, \varphi_{in}) + O(|\mathbf{p}_0/\hbar|) \\ &= \mathcal{L}_1(0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) + O(|\mathbf{p}_0/\hbar|) \end{aligned} \quad (18.48)$$

Para $\mathcal{L}_j(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$ arbitrario, podemos estimar su valor repitiendo los argumentos anteriores las veces que sean necesarias, para obtener:

$$\mathcal{L}_j(\mathbf{p}_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) = \mathcal{L}_j(0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) + O(|\mathbf{p}_0/\hbar|) \quad (18.49)$$

Así, por las ecuaciones (18.39),(18.40),(18.41),(18.42) y (18.49), concluimos que en el límite cuando $|\frac{\mathbf{p}}{\hbar}| \rightarrow 0$, la pureza del estado $\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$ se puede estimar como:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(\varphi_{out, \mathbf{p}_0}) &= 1 + \sum_{i=1}^{15} \mathcal{L}_i(0, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) + O(|\mathbf{p}_0/\hbar|) \\ &= \mathbf{p}(\varphi_{out}) + O(|\mathbf{p}_0/\hbar|) \end{aligned} \quad (18.50)$$

□

Denotamos por,

$$\mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m) := \mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2m) - I - i|\mathbf{p}/\hbar|\Sigma_1^0 + |\mathbf{p}/\hbar|^2\Sigma_2^0 \quad (18.51)$$

Es claro que por el teorema de Kato - Jensen,

$$\|\mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m)\|_{\mathcal{B}(L^2(S^2))} \leq \begin{cases} |\mathbf{p}/\hbar|^2 o(1) & \text{si } \beta > 5 \\ |\mathbf{p}/\hbar|^2 O(|\mathbf{p}/\hbar|) & \text{si } \beta > 7 \end{cases} \quad (18.52)$$

En donde $o(1)$ y $O(|\mathbf{p}/\hbar|)$ son funciones acotadas de $|\mathbf{p}/\hbar|$ tales que, $\lim_{|\mathbf{p}/\hbar| \rightarrow 0} o(1) = 0$ y $O(|\mathbf{p}/\hbar|) \leq C|\mathbf{p}/\hbar|$ para $|\mathbf{p}/\hbar| \leq 1$.

Ahora calcularemos a primer orden la pureza del estado φ_{out} .

Teorema 18.4. *Supongamos que la suposición sobre el potencial V se cumple y que en cero H_{rel} no tiene una resonancia o un valor propio. Entonces en el límite cuando $\sigma/\hbar \rightarrow 0$,*

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(\varphi_{out}) &= \mathbf{p} \left([I + i|\mathbf{p}/\hbar|\Sigma_1^0 - |\mathbf{p}/\hbar|^2\Sigma_2^0] \varphi_{in} \right) \\ &\quad + \begin{cases} o(|\sigma/\hbar|^2) & \text{si } \beta > 5 \\ O(|\sigma/\hbar|^3) & \text{si } \beta > 7 \end{cases} \end{aligned} \quad (18.53)$$

Demostración

Primero escribimos a φ_{out} de la siguiente manera,

$$\varphi_{out} = \varphi_{out,1} + \mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}$$

En donde,

$$\varphi_{out,1} = [I + i|\mathbf{p}/\hbar|\Sigma_1^0 - |\mathbf{p}/\hbar|^2\Sigma_2^0] \varphi_{in} \quad (18.54)$$

Así, usando esta descomposición tenemos que la pureza de φ_{out} está dada por,

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(\varphi_{out}) &= \mathbf{p}(\varphi_{out,1} + \mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^{12}} \varphi_{out,1}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \overline{\varphi_{out,1}(\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3)} \varphi_{out,1}(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) \overline{\varphi_{out,1}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_4)} d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 + \sum_{i=1}^{15} \mathcal{L}_i(\sigma, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) \\ &= \mathbf{p}(\varphi_{out,1}) + \sum_{i=1}^{15} \mathcal{L}_i(\sigma, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) \end{aligned}$$

Aquí introducimos $\mathcal{L}_i(\sigma, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$ que se define en función de (18.35) de la siguiente manera,

$$\mathcal{L}_i(\sigma, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) = \mathcal{L}(\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$$

En donde k ($1 \leq k \leq 4$) de las ψ_j son iguales a $\mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}$ y las $4 - k$ restantes son iguales a $\varphi_{out,1}$. Definiendo,

$$\mathcal{R}(\sigma) := \sum_{i=1}^{15} \mathcal{L}_i(\sigma, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) \quad (18.55)$$

Tenemos que,

$$\mathbf{p}(\varphi_{out}) = \mathbf{p}(\varphi_{out,1}) + \mathcal{R}(\sigma) \quad (18.56)$$

Ahora tomemos $\beta > 7$ y sin pérdida de generalidad tomemos también,

$$\mathcal{L}_{15}(\sigma, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) = \mathcal{L}(\varphi_{out,1}, \varphi_{out,1}, \varphi_{out,1}, \mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}) \quad (18.57)$$

Luego por (18.36) tenemos que,

$$\begin{aligned} & \left| \mathcal{L}(\varphi_{out,1}, \varphi_{out,1}, \varphi_{out,1}, \mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}) \right| \\ & \leq \|\varphi_{out,1}\|^3 \cdot \|\mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}\| \leq C \|\mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}\| \end{aligned} \quad (18.58)$$

Para alguna constante real C . Ahora por la ecuación (18.52) y tomando el hecho de que $O(|\mathbf{p}/\hbar|) \leq C|\mathbf{p}/\hbar|$ en el límite cuando $|\frac{\mathbf{p}}{\hbar}| \rightarrow 0$ tenemos que,

$$\begin{aligned} \|\mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}\|^2 &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \|\mathcal{T}_1(p^2/2m)\varphi_{in}\|_{L^2(S^2)}^2 p dp d\mathbf{p}_{cm} \\ &\leq \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \|\mathcal{T}_1(p^2/2m)\|^2 \|\varphi_{in}\|_{L^2(S^2)}^2 p dp d\mathbf{p}_{cm} \leq C \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \left| \frac{\mathbf{p}^3}{\hbar^3} \right|^2 \|\varphi_{in}\|_{L^2(S^2)}^2 p dp d\mathbf{p}_{cm} \\ &= C \left| \frac{1}{\hbar^3} \right|^2 \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \|\mathbf{p}^3 \varphi_{in}\|_{L^2(S^2)}^2 p dp d\mathbf{p}_{cm} = C \left| \frac{1}{\hbar^3} \right|^2 \|\mathbf{p}^3 \varphi_{in}\|^2 \end{aligned}$$

Ahora desarrollemos $\|\mathbf{p}^3 \varphi_{in}\|^2$ en las variables $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ para después hacer el cambio, $\mathbf{p}/\sigma \rightarrow \mathbf{q}$ y $\mathbf{p}_{1,2}/\sigma \rightarrow \mathbf{q}_{1,2}$,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{p}^3 \varphi_{in}\|^2 &= \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{p}^6 \exp\left(\frac{-\mathbf{p}_1^2 - \mathbf{p}_2^2}{\sigma^2}\right) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \\ &= \frac{1}{(\sigma^2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \sigma^6 \mathbf{q}^6 \exp(-\mathbf{q}_1^2 - \mathbf{q}_2^2) \sigma^3 d\mathbf{q}_1 \sigma^3 d\mathbf{q}_2 = \sigma^6 \cdot \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{q}^6 \exp(-\mathbf{q}_1^2 - \mathbf{q}_2^2) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \\ &= \sigma^6 \|\mathbf{q} \psi_{in}\|^2 \end{aligned}$$

Así para alguna constante $C > 0$, se tiene que:

$$\|\mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}\| \leq C \left| \frac{\sigma^3}{\hbar^3} \right| \quad (18.59)$$

Luego por las ecuaciones (18.57), (18.58) y (18.59) concluimos que,

$$|\mathcal{L}_{15}(\sigma, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)| \leq C \left| \frac{\sigma^3}{\hbar^3} \right| \quad (18.60)$$

Notemos que por la ecuación (18.36) el argumento anterior es válido para toda $\mathcal{L}_i(\sigma, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$, en donde una de las ψ_j es igual a $\mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}$ y las otras tres son iguales a $\varphi_{out,1}$.

En el caso cuando $\mathcal{L}_i(\sigma, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$ tenga l ($2 \leq l \leq 4$) de las ψ_j iguales a $\mathcal{T}_1(\mathbf{p}^2/2m)\varphi_{in}$ y las $4-l$ restantes iguales a $\varphi_{out,1}$ se tiene que, por las ecuaciones (18.36), (18.59) y análogamente a como se estimo el modulo de \mathcal{L}_{15} ,

$$|\mathcal{L}_i(\sigma, \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)| \leq C \left| \frac{\sigma^3}{\hbar^3} \right|^l, \quad 2 \leq l \leq 4$$

Pero, ya que estamos en el límite cuando $\sigma/\hbar \rightarrow 0$ estos términos de orden l quedan dominados por los términos de orden uno. Así, por el argumento anterior y por las ecuaciones (18.55), (18.56) y (18.60) concluimos que para $\beta > 7$,

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(\varphi_{out}) &= \mathbf{p}(\varphi_{out,1}) + O(|\sigma^3/\hbar^3|) \\ &= \mathbf{p} \left([I + i|\mathbf{p}/\hbar|\Sigma_1^0 - |\mathbf{p}/\hbar|^2\Sigma_2^0] \varphi_{in} \right) + O(|\sigma^3/\hbar^3|) \end{aligned}$$

De manera análoga para el caso en el que $\beta > 5$ concluimos que,

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(\varphi_{out}) &= \mathbf{p}(\varphi_{out,1}) + o(|\sigma^2/\hbar^2|) \\ &= \mathbf{p} \left([I + i|\mathbf{p}/\hbar|\Sigma_1^0 - |\mathbf{p}/\hbar|^2\Sigma_2^0] \varphi_{in} \right) + o(|\sigma^2/\hbar^2|) \end{aligned}$$

Por tanto la estimación (18.53) se cumple. \square

Por la definición del momento relativo \mathbf{p} y del momento del centro de masa \mathbf{p}_{cm} tenemos que,

$$\mathbf{p}_1 = \mu_1 \mathbf{p}_{cm} + \mathbf{p} \quad (18.61a)$$

$$\mathbf{p}_2 = \mu_2 \mathbf{p}_{cm} - \mathbf{p} \quad (18.61b)$$

Es claro que,

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_1^2 &= \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_1 = (\mu_1 \mathbf{p}_{cm} + \mathbf{p}) \cdot (\mu_1 \mathbf{p}_{cm} + \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2 + 2\mu_1 \mathbf{p}_{cm} \cdot \mathbf{p} + \mu_1^2 \mathbf{p}_{cm}^2 \\ \mathbf{p}_2^2 &= \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{p}_2 = (\mu_2 \mathbf{p}_{cm} - \mathbf{p}) \cdot (\mu_2 \mathbf{p}_{cm} - \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2 - 2\mu_2 \mathbf{p}_{cm} \cdot \mathbf{p} + \mu_2^2 \mathbf{p}_{cm}^2 \end{aligned}$$

Haciendo este cambio en la ecuación (18.6) obtenemos,

$$\varphi_{in}(\mathbf{p}, \mathbf{p}_{cm}) = \frac{1}{(\sigma^2\pi)^{3/2}} e^{-\frac{\mathbf{p}^2 + (\mu_1 - \mu_2)\mathbf{p}_{cm} \cdot \mathbf{p}}{\sigma^2}} e^{-\frac{(\mu_1^2 + \mu_2^2)}{2\sigma^2} \mathbf{p}_{cm}^2} \quad (18.62)$$

De forma similar, haciendo el cambio de variable

$$\mathbf{q}_1 = \mu_1 \mathbf{q}_{cm} + \mathbf{q} \quad (18.63a)$$

$$\mathbf{q}_2 = \mu_2 \mathbf{q}_{cm} - \mathbf{q} \quad (18.63b)$$

En la ecuación (18.12) obtenemos,

$$\psi_{in}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_{cm}) = \frac{1}{\pi^{3/2}} e^{-\mathbf{q}^2 - (\mu_1 - \mu_2)\mathbf{q}_{cm} \cdot \mathbf{q}} e^{-\frac{(\mu_1^2 + \mu_2^2)}{2} \mathbf{q}_{cm}^2} \quad (18.64)$$

Sea $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^6)$ un estado cuántico normalizado. Denotamos por $I(\varphi)$ al integrando de la pureza $\mathbf{p}(\varphi)$,

$$I(\varphi) := \varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \overline{\varphi(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_2)} \varphi(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) \overline{\varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_4)} \quad (18.65)$$

Así, haciendo el cambio de variable $\mathbf{q}_i = \mathbf{p}_i/\sigma$ tenemos que,

$$\begin{aligned} \mathbf{p} \left([I + i|\mathbf{p}/\hbar|\Sigma_1^0 - |\mathbf{p}/\hbar|^2\Sigma_2^0] \varphi_{in} \right) &= \int_{\mathbb{R}^{12}} \mathbf{I} \left([I + i|\mathbf{p}/\hbar|\Sigma_1^0 - |\mathbf{p}/\hbar|^2\Sigma_2^0] \varphi_{in} \right) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 d\mathbf{p}_3 d\mathbf{p}_4 \\ &= \int_{\mathbb{R}^{12}} \mathbf{I} \left([I + i\sigma|\mathbf{q}/\hbar|\Sigma_1^0 - \sigma^2|\mathbf{q}/\hbar|^2\Sigma_2^0] \frac{1}{\sigma^3} \psi_{in} \right) \sigma^{12} d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 d\mathbf{q}_3 d\mathbf{q}_4 \\ &= \int_{\mathbb{R}^{12}} \mathbf{I} \left([I + i(\sigma/\hbar)|\mathbf{q}|\Sigma_1^0 - (\sigma^2/\hbar^2)|\mathbf{q}|^2\Sigma_2^0] \psi_{in} \right) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 d\mathbf{q}_3 d\mathbf{q}_4 \end{aligned} \quad (18.66)$$

Ahora, ya que estamos en el límite cuando $|\mathbf{p}/\hbar| \rightarrow 0$ y $|\sigma/\hbar| \rightarrow 0$ podemos desarrollar el integrando $\mathbf{I}([I + i(\sigma/\hbar)|\mathbf{q}|\Sigma_1^0 - (\sigma^2/\hbar^2)|\mathbf{q}|^2\Sigma_2^0] \psi_{in})$ hasta términos de orden $|\sigma/\hbar|^2$ de la siguiente forma,

$$\mathbf{I}([I + i(\sigma/\hbar)|\mathbf{q}|\Sigma_1^0 - (\sigma^2/\hbar^2)|\mathbf{q}|^2\Sigma_2^0] \psi_{in}) = \mathbf{A}_0 + (\sigma/\hbar) \mathbf{A}_1 + (\sigma/\hbar)^2 \mathbf{A}_2 + O(|\sigma/\hbar|^3) \quad (18.67)$$

Con $\mathbf{A}_0, \mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2$ funciones de $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4$. De esta forma, integrando (18.67) obtendremos una expansión hasta términos de orden $(\sigma/\hbar)^2$ de la pureza (18.66),

$$\begin{aligned} &\mathbf{p} \left([I + i|\mathbf{p}/\hbar|\Sigma_1^0 - |\mathbf{p}/\hbar|^2\Sigma_2^0] \varphi_{in} \right) \\ &= \int_{\mathbb{R}^{12}} \mathbf{A}_0 d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 + \frac{\sigma}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^{12}} \mathbf{A}_1 d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 + \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^{12}} \mathbf{A}_2 d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 + O(|\sigma/\hbar|^3) \\ &= B_0 + \frac{\sigma}{\hbar} B_1 + \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 B_2 + O(|\sigma/\hbar|^3) \end{aligned} \quad (18.68)$$

En donde B_0, B_1, B_2 son números reales.

Para esto primero denotamos por,

$$a_1 + b_1 + c_1 = \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) + i(\sigma/\hbar)|\mathbf{q}|\Sigma_1^0\psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) - (\sigma^2/\hbar^2)|\mathbf{q}|^2\Sigma_2^0\psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \quad (18.69a)$$

$$a_2 + b_2 + c_2 = \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) + i(\sigma/\hbar)|\mathbf{q}|\Sigma_1^0\psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) - (\sigma^2/\hbar^2)|\mathbf{q}|^2\Sigma_2^0\psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \quad (18.69b)$$

$$a_3 + b_3 + c_3 = \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4) + i(\sigma/\hbar)|\mathbf{q}|\Sigma_1^0\psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4) - (\sigma^2/\hbar^2)|\mathbf{q}|^2\Sigma_2^0\psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4) \quad (18.69c)$$

$$a_4 + b_4 + c_4 = \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) + i(\sigma/\hbar)|\mathbf{q}|\Sigma_1^0\psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) - (\sigma^2/\hbar^2)|\mathbf{q}|^2\Sigma_2^0\psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) \quad (18.69d)$$

En donde,

$$\begin{aligned} (\sigma/\hbar)|\mathbf{q}|\Sigma_1^0\psi_{in}(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) &= (\sigma/\hbar)|\mu_2\mathbf{q}_i - \mu_1\mathbf{q}_j|\Sigma_1^0\psi_{in}(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) \\ (\sigma^2/\hbar^2)|\mathbf{q}|^2\Sigma_2^0\psi_{in}(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) &= (\sigma^2/\hbar^2)|\mu_2\mathbf{q}_i - \mu_1\mathbf{q}_j|^2\Sigma_2^0\psi_{in}(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) \end{aligned}$$

con la correspondencia,

$$\begin{aligned} a_i &\longleftrightarrow \psi_{in} \\ b_i &\longleftrightarrow i(\sigma/\hbar)|\mathbf{q}|\Sigma_1^0\psi_{in} \\ c_i &\longleftrightarrow -(\sigma^2/\hbar^2)|\mathbf{q}|^2\Sigma_2^0\psi_{in} \end{aligned}$$

Así, el integrando $\mathbf{I}([I + i(\sigma/\hbar)|\mathbf{q}|\Sigma_1^0 - (\sigma^2/\hbar^2)|\mathbf{q}|^2\Sigma_2^0] \psi_{in})$ se puede escribir como,

$$\begin{aligned} &\mathbf{I}([I + i(\sigma/\hbar)|\mathbf{q}|\Sigma_1^0 - (\sigma^2/\hbar^2)|\mathbf{q}|^2\Sigma_2^0] \psi_{in}) \\ &= (a_1 + b_1 + c_1)\overline{(a_2 + b_2 + c_2)}(a_3 + b_3 + c_3)\overline{(a_4 + b_4 + c_4)} \end{aligned} \quad (18.70)$$

De las ecuaciones (18.69) y (18.70) observamos que el termino de orden cero \mathbf{A}_0 del integrando de la pureza es,

$$\mathbf{A}_0 = a_1 \overline{a_2} a_3 \overline{a_4} = \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4) \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) = \mathbf{I}(\psi_{in}) \quad (18.71)$$

Luego por las ecuaciones (18.12),(18.65), (18.68) y (18.71) tenemos que el termino de orden cero B_0 de la pureza esta dado por,

$$B_0 = \int_{\mathbb{R}^{12}} \mathbf{A}_0 d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 = \int_{\mathbb{R}^{12}} I(\psi_{in}) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 = \mathbf{p}(\psi_{in}) = 1 \quad (18.72)$$

Ahora obtengamos el termino de orden uno $\mathbf{A}_1|\sigma/\hbar|$ del integrando de la pureza. De las ecuaciones (18.69) y (18.70) observamos los términos de orden $|\sigma/\hbar|$ del integrando de la pureza son,

$$\begin{aligned} b_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{a}_4, & \quad a_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{a}_4 \\ a_1 \bar{a}_2 b_3 \bar{a}_4, & \quad a_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{b}_4 \end{aligned}$$

Es claro que por la ecuación (18.67),

$$\mathbf{A}_1|\sigma/\hbar| = b_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{a}_4 + a_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{a}_4 + a_1 \bar{a}_2 b_3 \bar{a}_4 + a_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{b}_4 \quad (18.73)$$

y que por la ecuación (18.68) el termino de primer orden $B_1|\sigma/\hbar|$ de la pureza esta dado por

$$B_1|\sigma/\hbar| = \int_{\mathbb{R}^{12}} b_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{a}_4 + a_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{a}_4 + a_1 \bar{a}_2 b_3 \bar{a}_4 + a_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{b}_4 d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_4 \quad (18.74)$$

Pero ya que en el cálculo de la pureza las variables $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_4$ son mudas tenemos que,

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^{12}} b_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 &= \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{a}_2 b_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 \\ \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 &= \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{b}_4 d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 \end{aligned}$$

Luego observamos que,

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^{12}} b_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 + \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{a}_2 b_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 \\ &= 2i \int_{\mathbb{R}^{12}} \frac{\sigma}{\hbar} |\mathbf{q}| \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4) \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 \quad (18.75) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 + \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{b}_4 d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 \\ &= -2i \int_{\mathbb{R}^{12}} \frac{\sigma}{\hbar} |\mathbf{q}| \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4) \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 \quad (18.76) \end{aligned}$$

Así, por las ecuaciones (B.1) y (18.74), el termino de orden uno $B_1|\sigma/\hbar|$ de la pureza, esta dado por la suma de las ecuaciones (18.75) y (18.76) cuya suma es claramente cero. Por tanto,

$$B_1|\sigma/\hbar| = 0 \quad (18.77)$$

Ahora obtengamos el termino de orden dos $B_2|\sigma/\hbar|^2$ de la pureza. Para esto, de las ecuaciones (18.69) y (18.70) observamos que los términos de orden $|\sigma/\hbar|^2$, del integrando de la pureza, se pueden dividir en dos grupos. El primero es el que consiste de términos que son el producto de dos coeficientes a_i y dos b_i . Así el primer grupo es,

$$\begin{aligned} & b_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{a}_4, \quad a_1 \bar{a}_2 b_3 \bar{b}_4 \\ & b_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{b}_4, \quad a_1 \bar{b}_2 b_3 \bar{a}_4 \\ & a_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{b}_4, \quad b_1 \bar{a}_2 b_3 \bar{a}_4 \end{aligned}$$

Más aun, ya que en el cálculo de la pureza las variables $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_4$ son mudas, tenemos que,

$$\int_{\mathbb{R}^{12}} b_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{a}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 = \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{a}_2 b_3 \bar{b}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 \quad (18.78)$$

$$\int_{\mathbb{R}^{12}} b_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{b}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 = \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{b}_2 b_3 \bar{a}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 \quad (18.79)$$

$$\int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{b}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 = \int_{\mathbb{R}^{12}} b_1 \bar{a}_2 b_3 \bar{a}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 \quad (18.80)$$

Desarrollando el lado izquierdo de la ecuación (18.78) tenemos que por las ecuaciones (18.10) y (18.12),

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^{12}} b_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{a}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 \\ &= \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^{12}} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_3 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 \\ &= \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^{12}} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_3 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \cdot \psi(\mathbf{q}_1) \cdot \psi(\mathbf{q}_3) \cdot \psi^2(\mathbf{q}_4) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 \\ &= \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^9} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_3 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_3) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_3 \cdot \int_{\mathbb{R}^3} \psi^2(\mathbf{q}_4) d\mathbf{q}_4 \\ &= \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^9} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_3 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_3) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_3 \end{aligned}$$

Luego, definimos a $P_{1,1}(\psi_{in})$ de la siguiente forma,

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 P_{1,1}(\psi_{in}) := \\ & \int_{\mathbb{R}^{12}} b_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{a}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 + \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{a}_2 b_3 \bar{b}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 \\ &= 2 \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^9} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_3 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_3) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_3 \quad (18.81) \end{aligned}$$

Desarrollando el lado izquierdo de la ecuación (18.79), tenemos que por las ecuaciones (18.10) y (18.12),

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^{12}} b_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{b}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 \\ &= \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^{12}} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_4| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 \\ &= \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^{12}} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_4| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) \cdot \psi(\mathbf{q}_2) \cdot \psi(\mathbf{q}_4) \cdot \psi^2(\mathbf{q}_3) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^9} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_4| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_4) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 d\mathbf{q}_4 \cdot \int_{\mathbb{R}^3} \psi^2(\mathbf{q}_3) d\mathbf{q}_3 \\
&= \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^9} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_4| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_4) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 d\mathbf{q}_4
\end{aligned}$$

Y definimos a $P_{1,2}(\psi_{in})$ de la siguiente forma,

$$\begin{aligned}
& - \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 P_{1,2}(\psi_{in}) := \\
& \int_{\mathbb{R}^{12}} b_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{b}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 + \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{b}_2 b_3 \bar{a}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 \\
& = 2 \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^9} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_3| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_3) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 d\mathbf{q}_3 \quad (18.82)
\end{aligned}$$

Desarrollando el lado izquierdo de la ecuación (18.80), tenemos que por las ecuaciones (18.10) y (18.12),

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{b}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 \\
& = - \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^{12}} |\mu_2 \mathbf{q}_3 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_4| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 \\
& = - \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \left[\int_{\mathbb{R}^6} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \right]^2
\end{aligned}$$

Y definimos a $P_{1,3}(\psi_{in})$ de la siguiente forma,

$$\begin{aligned}
& - \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 P_{1,3}(\psi_{in}) := \\
& \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{b}_2 a_3 \bar{b}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 + \int_{\mathbb{R}^{12}} b_1 \bar{a}_2 b_3 \bar{a}_4 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_4 \\
& = -2 \left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 \left[\int_{\mathbb{R}^6} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \cdot \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \right]^2 \quad (18.83)
\end{aligned}$$

Ahora, el segundo grupo de términos de orden $|\sigma/\hbar|^2$ del integrando de la pureza es el que está formado por términos que son el producto de tres coeficientes a_i y un coeficiente c_i . Así el segundo grupo es,

$$\begin{aligned}
& c_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{a}_4, \quad a_1 \bar{c}_2 a_3 \bar{a}_4 \\
& a_1 \bar{a}_2 c_3 \bar{a}_4, \quad a_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{c}_4
\end{aligned}$$

De nuevo, ya que en el cálculo de la pureza las variables $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_4$ son mudas y c_i es un coeficiente real, tenemos que:

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^{12}} c_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_4 = \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{c}_2 a_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_4 \\
& = \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{a}_2 c_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_4 = \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{c}_4 d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_4 \quad (18.84)
\end{aligned}$$

Desarrollando el extremo izquierdo de (18.84) tenemos que por las ecuaciones (18.10) y (18.12),

$$\int_{\mathbb{R}^{12}} c_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_4$$

$$\begin{aligned}
&= - \left(\frac{\sigma}{\hbar} \right)^2 \int_{\mathbb{R}^{12}} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 \Sigma_2^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2) \psi_{in}(\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4) \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_4) d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_4 \\
&= - \left(\frac{\sigma}{\hbar} \right)^2 \int_{\mathbb{R}^{12}} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 \Sigma_2^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \psi^2(\mathbf{q}_3) \psi^2(\mathbf{q}_4) d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_4 \\
&= - \left(\frac{\sigma}{\hbar} \right)^2 \int_{\mathbb{R}^{12}} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 \Sigma_2^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \cdot \left[\int_{\mathbb{R}^3} \psi^2(\mathbf{q}) d\mathbf{q} \right]^2 \\
&= - \left(\frac{\sigma}{\hbar} \right)^2 \int_{\mathbb{R}^{12}} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 \Sigma_2^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2
\end{aligned}$$

Y definimos a $P_2(\psi_{in})$ de la siguiente forma,

$$\begin{aligned}
&- \left(\frac{\sigma}{\hbar} \right)^2 P_2(\psi_{in}) := \\
&\int_{\mathbb{R}^{12}} c_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_4 + \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{c}_2 a_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_4 \\
&+ \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{a}_2 c_3 \bar{a}_4 d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_4 + \int_{\mathbb{R}^{12}} a_1 \bar{a}_2 a_3 \bar{c}_4 d\mathbf{q}_1, \dots, d\mathbf{q}_4 \\
&= -4 \left(\frac{\sigma}{\hbar} \right)^2 \int_{\mathbb{R}^{12}} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 \Sigma_2^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \quad (18.85)
\end{aligned}$$

Luego, por las ecuaciones (B.1) y (18.74), el termino de orden dos $B_2|\sigma/\hbar|$ de la pureza, esta dado por la suma de las ecuaciones (18.81), (18.82), (18.83) y (18.85),

$$B_2|\sigma/\hbar| = - \left(\frac{\sigma}{\hbar} \right)^2 [P_{1,1}(\psi_{in}) + P_{1,2}(\psi_{in}) + P_{1,3}(\psi_{in}) + P_2(\psi_{in})] \quad (18.86)$$

Así, por las ecuaciones (18.68), (18.72), (18.77) y (18.86) tenemos la expansión hasta términos de orden $(\sigma/\hbar)^2$ de la pureza (18.66) en el límite cuando $|\mathbf{p}/\hbar| \rightarrow 0$ y $|\sigma/\hbar| \rightarrow 0$,

$$\mathbf{p} \left([I + i|\mathbf{p}/\hbar|\Sigma_1^0 - |\mathbf{p}/\hbar|^2\Sigma_2^0] \varphi_{in} \right) = 1 - \left(\frac{\sigma}{\hbar} \right)^2 \left[\sum_{k=1}^3 P_{1,k}(\psi_{in}) + P_2(\psi_{in}) \right] + O(|\sigma/\hbar|^3) \quad (18.87)$$

Ahora desarrollemos las integrales de $P_{1,1}(\psi_{in})$, $P_{1,2}(\psi_{in})$ y $P_{1,3}(\psi_{in})$. Primero calculemos explícitamente a $\Sigma_1^0 \psi_{in}$. Ya que $\Sigma_1^0 = -\frac{2c_0}{\sqrt{4\pi}} \left\langle \cdot, \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \right\rangle$ en donde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ es el producto escalar de $L^2(\mathcal{S}^2)$ respecto a la coordenada relativa \mathbf{q} , tenemos haciendo el cambio a coordenadas esféricas $\mathbf{q} \rightarrow (q, \theta, \phi)$ y por la ecuación (18.64):

$$\begin{aligned}
\Sigma_1^0 \psi_{in} &= -\frac{2c_0}{\sqrt{4\pi}} \left\langle \psi_{in}, \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \right\rangle \\
&= -\frac{2c_0}{4\pi^{5/2}} \int_{\mathcal{S}^2} \exp \left[-\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{2} \mathbf{q}_{cm}^2 - q^2 \right] \exp [-(\mu_1 - \mu_2)|\mathbf{q}_{cm}|q \cos(\theta)] \sin(\theta) d\theta d\phi \\
&= -\frac{2c_0}{4\pi^{5/2}} \exp \left[-\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{2} \mathbf{q}_{cm}^2 - q^2 \right] \int_{\mathcal{S}^2} \exp [-(\mu_1 - \mu_2)|\mathbf{q}_{cm}|q \cos(\theta)] \sin(\theta) d\theta d\phi \\
&= -\frac{c_0}{\pi^{3/2}} \exp \left[-\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{2} \mathbf{q}_{cm}^2 - q^2 \right] \int_0^\pi \exp [-(\mu_1 - \mu_2)|\mathbf{q}_{cm}|q \cos(\theta)] \sin(\theta) d\theta \\
&= -\frac{2c_0}{\pi^{3/2}} \exp \left[-\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{2} \mathbf{q}_{cm}^2 - q^2 \right] \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2)|\mathbf{q}_{cm}|q]}{(\mu_1 - \mu_2)|\mathbf{q}_{cm}|q}
\end{aligned}$$

Por tanto, en las coordenadas $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ tenemos que,

$$\begin{aligned} \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) &= -2 c_0 \langle \psi_{in}, Y_0 \rangle Y_0 = \\ &= -\frac{2 c_0}{\pi^{3/2}} \exp \left[-\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{2} |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^2 - |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 \right] \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|} \end{aligned} \quad (18.88)$$

Por la ecuación (18.81) tenemos que, $P_{1,1}(\psi_{in})$ se puede escribir como:

$$P_{1,1}(\psi_{in}) = -2 \int_{\mathbb{R}^3} \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \psi(\mathbf{q}_1) d\mathbf{q}_1 \right]^2 d\mathbf{q}_2 \quad (18.89)$$

Así, por las ecuaciones (18.10), (18.88) y (18.89) tenemos que:

$$\begin{aligned} P_{1,1}(\psi_{in}) &= \\ &= -\frac{8 c_0^2}{\pi^{9/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \exp \left[-\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{2} |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^2 - |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 - \frac{|\mathbf{q}_1|^2}{2} \right] \right. \\ &\quad \left. \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|} d\mathbf{q}_1 \right]^2 d\mathbf{q}_2 \end{aligned} \quad (18.90)$$

Por la ecuación (18.82) tenemos que, $P_{1,2}$ se puede escribir como:

$$\begin{aligned} P_{1,2}(\psi_{in}) &= -2 \int_{\mathbb{R}^3} \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \cdot \psi(\mathbf{q}_2) d\mathbf{q}_2 \right]^2 d\mathbf{q}_1 \\ &= -2 \int_{\mathbb{R}^3} \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\mu_2 \mathbf{q}_2 - \mu_1 \mathbf{q}_1| \Sigma_1^0 \psi_{in}(\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1) \cdot \psi(\mathbf{q}_1) d\mathbf{q}_1 \right]^2 d\mathbf{q}_2 \end{aligned} \quad (18.91)$$

Así, por las ecuaciones (18.10), (18.88) y (18.91) tenemos que:

$$\begin{aligned} P_{1,2}(\psi_{in}) &= \\ &= -\frac{8 c_0^2}{\pi^{9/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\mu_2 \mathbf{q}_2 - \mu_1 \mathbf{q}_1| \exp \left[-\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{2} |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^2 - |\mu_2 \mathbf{q}_2 - \mu_1 \mathbf{q}_1|^2 - \frac{|\mathbf{q}_1|^2}{2} \right] \right. \\ &\quad \left. \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_2 - \mu_1 \mathbf{q}_1|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_2 - \mu_1 \mathbf{q}_1|} d\mathbf{q}_1 \right]^2 d\mathbf{q}_2 \end{aligned} \quad (18.92)$$

Así también por las ecuaciones (18.88) y (18.83) tenemos que,

$$\begin{aligned} P_{1,3}(\psi_{in}) &= -\frac{8 c_0^2}{\pi^6} \left[\int_{\mathbb{R}^6} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \exp [(-\mu_1^2 - \mu_2^2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^2 - 2 |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2] \right. \\ &\quad \left. \cdot \exp [-(\mu_1 - \mu_2)(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \cdot (\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2)] \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|} d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \right]^2 \end{aligned} \quad (18.93)$$

Denotando por,

$$J(\mu_1, \mu_2) = \frac{1}{\pi^{9/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \exp \left[-\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{2} |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^2 - |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 - \frac{|\mathbf{q}_1|^2}{2} \right] \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|} d\mathbf{q}_1 \right]^2 d\mathbf{q}_2 \quad (18.94)$$

Y por,

$$L(\mu_1, \mu_2) = \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^6} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \exp [(-\mu_1^2 - \mu_2^2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^2 - 2 |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2] \cdot \exp [-(\mu_1 - \mu_2)(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \cdot (\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2)] \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|} d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \quad (18.95)$$

Tenemos por las ecuaciones (18.90), (18.92), (18.93), (18.94), (D.1) y utilizando el hecho de que $\mu_2 = 1 - \mu_1$,

$$P_{1,1}(\psi_{in}) = -8 c_0^2 J(\mu_1, 1 - \mu_1) \quad (18.96)$$

$$P_{1,2}(\psi_{in}) = -8 c_0^2 J(1 - \mu_1, \mu_1) \quad (18.97)$$

$$P_{1,3}(\psi_{in}) = 8 c_0^2 [L(\mu_1, 1 - \mu_1)]^2 \quad (18.98)$$

Ahora desarrollemos la integral de $P_2(\psi_{in})$. Para esto primero denotamos por,

$$q := |\mathbf{q}| \\ q_{cm} := |\mathbf{q}_{cm}|$$

Y por,

$$I_0(\mathbf{q}_{cm}, q) := \int_{\mathcal{S}^2} \psi_{in}(\mathbf{q}_{cm}, q \bar{\omega}) \cdot Y_1(\bar{\omega}) \sen(\theta) d\theta d\phi \quad (18.100)$$

En donde $\bar{\omega} \in \mathcal{S}^2$ y $\mathbf{q} = q \bar{\omega}$. De la definición de $Y_1(\bar{\omega})$, notamos que esta es una función impar, es decir $Y_1(-\bar{\omega}) = -Y_1(\bar{\omega})$.

Ya que un vector en \mathcal{S}^2 se puede representar en coordenadas esféricas por medio de sus ángulos acimutal ϕ ($0 \leq \phi < 2\pi$) y de colatitud θ ($0 \leq \theta \leq \pi$) tenemos que, si $\bar{\omega} \in \mathcal{S}^2$ está representado por los ángulos (θ, ϕ) en un sistema de coordenadas fijo, entonces el vector $-\bar{\omega}$ va a estar representado por los ángulos $(\pi - \theta, \phi + \pi)$ en ese mismo sistema de coordenadas. Así, Y_1 puede ser expresado como función de (θ, ϕ) , es decir, $Y_1 = Y_1(\theta, \phi)$ y de esta forma, ya que es una función impar, tenemos que:

$$Y_1(\pi - \theta, \phi + \pi) = Y_1(-\bar{\omega}) = -Y_1(\bar{\omega}) = -Y_1(\theta, \phi) \quad (18.101)$$

Sean $\mathbf{q}_{cm} \in \mathbb{R}^3$ y $q \geq 0$ fijos. Ahora, sin pérdida de generalidad, escogamos un sistema de coordenadas en el que el vector \mathbf{q}_{cm} sea paralelo al eje z y este representado en coordenadas cartesianas por, $\mathbf{q}_{cm} = (0, 0, q_{cm})$. De la ecuación (18.64) observamos que ψ_{in} es una función que depende solamente de q , q_{cm} y del ángulo entre los vectores \mathbf{q} y \mathbf{q}_{cm} , pero en el sistema de referencia escogido, el ángulo entre estos dos vectores no es más que el ángulo de colatitud, θ del vector $q \bar{\omega}$, es decir,

$\psi_{in} = \psi_{in}(q_{cm}, q, \theta)$. Por lo anterior y por la ecuación (18.100) tenemos que para este sistema de referencia y para este vector \mathbf{q}_{cm} :

$$I_0(\mathbf{q}_{cm}, q) = \int_{S^2} \psi_{in}(q_{cm}, q, \theta) \cdot Y_1(\theta, \phi) \text{sen}(\theta) d\theta d\phi \quad (18.102)$$

Ahora consideremos el caso en el que tenemos $-\mathbf{q}_{cm}$. Es claro que, $-\mathbf{q}_{cm} = (0, 0, -q_{cm})$ y que ahora el ángulo entre \mathbf{q} y $-\mathbf{q}_{cm}$ esta dado por la diferencia $\pi - \theta$, en donde θ es el ángulo de colatitud del vector $q\bar{\omega}$ en el sistema de referencia escogido anteriormente. Por lo anterior tenemos que para $-\mathbf{q}_{cm}$:

$$I_0(-\mathbf{q}_{cm}, q) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \psi_{in}(q_{cm}, q, \pi - \theta) \cdot Y_1(\theta, \phi) \text{sen}(\theta) d\theta d\phi$$

Ahora hagamos el cambio de variable $\hat{\theta} = \pi - \theta$, $\hat{\phi} = \phi - \pi$ en la integral de la ecuación anterior, entonces tenemos por las ecuaciones (18.101) y (18.102):

$$\begin{aligned} I_0(-\mathbf{q}_{cm}, q) &= - \int_{-\pi}^\pi \int_\pi^0 \psi_{in}(q_{cm}, q, \hat{\theta}) \cdot Y_1(\pi - \hat{\theta}, \hat{\phi} + \pi) \text{sen}(\pi - \hat{\theta}) d\hat{\theta} d\hat{\phi} \\ &= \int_{-\pi}^\pi \int_0^\pi \psi_{in}(q_{cm}, q, \hat{\theta}) \cdot Y_1(\pi - \hat{\theta}, \hat{\phi} + \pi) \text{sen}(\hat{\theta}) d\hat{\theta} d\hat{\phi} = - \int_{-\pi}^\pi \int_0^\pi \psi_{in}(q_{cm}, q, \hat{\theta}) \cdot Y_1(\hat{\theta}, \hat{\phi}) \text{sen}(\hat{\theta}) d\hat{\theta} d\hat{\phi} \\ &= - \int_{S^2} \psi_{in}(q_{cm}, q, \hat{\theta}) \cdot Y_1(\hat{\theta}, \hat{\phi}) \text{sen}(\hat{\theta}) d\hat{\theta} d\hat{\phi} = -I_0(\mathbf{q}_{cm}, q) \end{aligned}$$

Y por tanto,

$$I_0(-\mathbf{q}_{cm}, q) = -I_0(\mathbf{q}_{cm}, q) \quad (18.103)$$

De la ecuación (18.88) es fácil ver que, $\langle \psi_{in}, Y_0 \rangle$ es una función que solo depende de q y q_{cm} dada por:

$$\langle \psi_{in}, Y_0 \rangle = \frac{2}{\pi} \exp \left[-\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{2} q_{cm}^2 - q^2 \right] \frac{\text{senh} \left[\frac{(\mu_1 - \mu_2) q_{cm} \cdot q}{(\mu_1 - \mu_2) q_{cm} \cdot q} \right]}{(\mu_1 - \mu_2) q_{cm} \cdot q} \quad (18.104)$$

Por la definición de Σ_2^0 y por la ecuación (18.85) tenemos que,

$$\begin{aligned} P_2(\psi_{in}) &= 4 \int_{\mathbb{R}^6} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \left[2c_0^2 \langle \psi_{in}, Y_0 \rangle Y_0 + \langle \psi_{in}, Y_1 \rangle Y_0 - \langle \psi_{in}, Y_0 \rangle Y_1 \right] d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \\ &= 8c_0^2 \int_{\mathbb{R}^6} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \langle \psi_{in}, Y_0 \rangle Y_0 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 + I_1(\psi_{in}) + I_2(\psi_{in}) \end{aligned} \quad (18.105)$$

En donde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ es el producto escalar de $L^2(\mathcal{S}^2)$ respecto a la coordenada relativa \mathbf{q} e introdujimos $I_1(\psi_{in})$, $I_2(\psi_{in})$ dados por,

$$\begin{aligned} I_1(\psi_{in}) &= 4 \int_{\mathbb{R}^6} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \langle \psi_{in}, Y_1 \rangle Y_0 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \\ I_2(\psi_{in}) &= -4 \int_{\mathbb{R}^6} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \langle \psi_{in}, Y_0 \rangle Y_1 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \end{aligned}$$

Desarrollemos a $I_1(\psi_{in})$ en las coordenadas \mathbf{q} y \mathbf{q}_{cm} . Por las ecuaciones (18.100) y (18.103) tenemos que,

$$\begin{aligned} I_1(\psi_{in}) &= 4 \int_{\mathbb{R}^6} |\mathbf{q}|^2 \psi_{in}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_{cm}) \langle \psi_{in}, Y_1 \rangle Y_0 d\mathbf{q} d\mathbf{q}_{cm} \\ &= 4 \int_{\mathbb{R}^6} |\mathbf{q}|^2 \psi_{in}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_{cm}) \left[\int_{\mathcal{S}^2} \psi_{in}(\mathbf{q}_{cm}, q\bar{\omega}) \cdot Y_1(\bar{\omega}) \text{sen}(\theta) d\theta d\phi \right] Y_0 d\mathbf{q} d\mathbf{q}_{cm} \\ &= 4 \int_{\mathbb{R}^3} \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{q}|^2 \psi_{in}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_{cm}) I_0(\mathbf{q}_{cm}, q) Y_0 d\mathbf{q} \right] d\mathbf{q}_{cm} = 0 \end{aligned}$$

Por tanto,

$$I_1(\psi_{in}) = 0 \quad (18.106)$$

Ahora desarrollemos a $I_2(\psi_{in})$ en las coordenadas \mathbf{q} y \mathbf{q}_{cm} para después hacer el cambio a coordenadas esféricas $\mathbf{q} \rightarrow (q, \theta, \phi)$ y $\mathbf{q}_{cm} \rightarrow (q_{cm}, \hat{\theta}, \hat{\phi})$. Por las ecuaciones (18.100), (18.103) y (18.104) tenemos que,

$$\begin{aligned} I_2(\psi_{in}) &= -4 \int_{\mathbb{R}^6} |\mathbf{q}|^2 \psi_{in}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_{cm}) \langle \psi_{in}, Y_0 \rangle Y_1 d\mathbf{q} d\mathbf{q}_{cm} \\ &= -4 \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty q^4 \langle \psi_{in}, Y_0 \rangle \left[\int_{\mathcal{S}^2} \psi_{in}(\mathbf{q}_{cm}, q\bar{\omega}) \cdot Y_1(\bar{\omega}) \text{sen}(\theta) d\theta d\phi \right] dq d\mathbf{q}_{cm} \\ &= -4 \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^3} q^4 \langle \psi_{in}, Y_0 \rangle I_0(\mathbf{q}_{cm}, q) d\mathbf{q}_{cm} dq \\ &= -4 \int_0^\infty q^4 \int_0^\infty q_{cm}^2 \langle \psi_{in}, Y_0 \rangle \left[\int_{\mathcal{S}^2} I_0(q_{cm} \bar{\omega}', q) \text{sen}(\hat{\theta}) d\hat{\theta} d\hat{\phi} \right] dq_{cm} dq = 0 \end{aligned}$$

En donde $\bar{\omega}' \in \mathcal{S}^2$ y $\mathbf{q}_{cm} = q_{cm} \bar{\omega}'$. Por tanto,

$$I_2(\psi_{in}) = 0 \quad (18.107)$$

Así, por las ecuaciones (18.104), (18.105), (18.106) y (18.107),

$$\begin{aligned} P_2(\psi_{in}) &= 8 c_0^2 \int_{\mathbb{R}^6} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 \psi_{in}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \langle \psi_{in}, Y_0 \rangle Y_0 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \\ &= \frac{8 c_0^2}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^6} \mathbf{q}^2 \exp [-(\mu_1^2 + \mu_2^2) \mathbf{q}_{cm}^2 - 2\mathbf{q}^2 - (\mu_1 - \mu_2) \mathbf{q}_{cm} \cdot \mathbf{q}] \frac{\text{senh} [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot |\mathbf{q}|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot |\mathbf{q}|} d\mathbf{q} d\mathbf{q}_{cm} \end{aligned}$$

Definiendo,

$$\begin{aligned} N(\mu_1, \mu_2) &= \\ \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^6} \mathbf{q}^2 \exp [-(\mu_1^2 + \mu_2^2) \mathbf{q}_{cm}^2 - 2\mathbf{q}^2 - (\mu_1 - \mu_2) \mathbf{q}_{cm} \cdot \mathbf{q}] \frac{\text{senh} [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot |\mathbf{q}|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot |\mathbf{q}|} d\mathbf{q} d\mathbf{q}_{cm} \end{aligned} \quad (18.108)$$

Y utilizando el hecho de que $\mu_2 = 1 - \mu_1$,

$$P_2(\psi_{in}) = 8 c_0^2 N(\mu_1, 1 - \mu_1) \quad (18.109)$$

Luego por las ecuaciones (18.53),(18.87), (18.94), (D.1),(18.96)-(18.98) y (18.109) podemos escribir,

$$\mathbf{p}(\varphi_{out}) = 1 - 8 \frac{c_0^2 \sigma^2}{\hbar^2} \left[[L(\mu_1, 1 - \mu_1)]^2 + N(\mu_1, 1 - \mu_1) - J(\mu_1, 1 - \mu_1) - J(1 - \mu_1, \mu_1) \right] + \begin{cases} o(|\sigma/\hbar|^2) & \text{si } \beta > 5 \\ O(|\sigma/\hbar|^3) & \text{si } \beta > 7 \end{cases} \quad (18.110)$$

Más aun, la solución de las integrales en las ecuaciones (D.1) y (18.108) está dada por,

$$L(\mu_1, 1 - \mu_1) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} [1 + (2\mu_1 - 1)^2]^{-1/2} \quad (18.111)$$

$$N(\mu_1, 1 - \mu_1) = \frac{1}{2(2\mu_1 - 1)^2} \frac{1}{\sqrt{1 + (2\mu_1 - 1)^2}} \cdot [1 + (2\mu_1 - 1)^2]^{3/2} - 1 \quad (18.112)$$

En el apéndice mostramos estos resultados a través de un cálculo explícito.

Denotamos al coeficiente de entrelazamiento como $\mathcal{E}(\mu_1)$, dado por,

$$\mathcal{E}(\mu_1) = 8 \left[[L(\mu_1, 1 - \mu_1)]^2 + N(\mu_1, 1 - \mu_1) - J(\mu_1, 1 - \mu_1) - J(1 - \mu_1, \mu_1) \right] \quad (18.113)$$

Con un valor $\mathcal{E}(1/2) = 0,4770$.

Luego por las ecuaciones (18.111) y (18.112),

$$\mathcal{E}(\mu_1) = \frac{16}{\pi[1 + (2\mu_1 - 1)^2]} + \frac{4}{(2\mu_1 - 1)^2} \cdot \frac{[1 + (2\mu_1 - 1)^2]^{3/2} - 1}{\sqrt{1 + (2\mu_1 - 1)^2}} - 8 J(\mu_1, 1 - \mu_1) - 8 J(1 - \mu_1, \mu_1) \quad (18.114)$$

Por lo anterior, la demostración del siguiente teorema es inmediata.

Teorema 18.5. *Supongamos que la suposición sobre el potencial V se cumple y que en cero H_{rel} no tiene una resonancia o un valor propio. Entonces en el límite cuando $\sigma/\hbar \rightarrow 0$*

$$\mathbf{p}(\varphi_{out}) = 1 - \left(\frac{c_0 \sigma}{\hbar} \right)^2 \mathcal{E}(\mu_1) + \begin{cases} o(|\sigma/\hbar|^2) & \text{si } \beta > 5 \\ O(|\sigma/\hbar|^3) & \text{si } \beta > 7 \end{cases} \quad (18.115)$$

Demostración

La ecuación (18.115) es consecuencia directa de las ecuaciones (18.110) y (18.114). □

Es en este punto en el que podemos recapitular lo que hemos hecho hasta ahora. Comenzamos con un estado inicial asintótico $\varphi_{in, \mathbf{p}_0}$ dado por el producto de dos estados Gaussianos normalizados, con la misma varianza σ y con momento promedio opuesto (ecs. (18.1) - (18.3)), de pureza 1 ya que se trata de un estado producto (ec. (18.4)). Recordemos que este estado libre inicial es al cual el estado del sistema dispersor tiende asintóticamente en la norma de $L^2(\mathbb{R}^6)$ para tiempos en el pasado remoto, esto es, para tiempos en el límite $t \rightarrow -\infty$ la dinámica de nuestro sistema dispersor puede ser bien aproximada por $e^{-itH_0} \varphi_{in, \mathbf{p}_0}$.

Después, con la matriz de dispersión (o mejor dicho, con la expansión de esta en el límite de bajas energías que da el teorema de Kato-Jensen) obtuvimos al estado asintótico final libre $\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$, al cual el estado del sistema dispersor tiende asintóticamente en la norma de $L^2(\mathbb{R}^6)$ para tiempos en el futuro lejano, esto es, para tiempos en el límite $t \rightarrow \infty$, la dinámica de nuestro sistema dispersor puede ser bien aproximada por $e^{-itH_0}\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$. Sin embargo, debemos notar que solo estamos en posición de afirmar que el verdadero estado del sistema dispersor es a lo menos *cercano* (en la norma de $L^2(\mathbb{R}^6)$) al estado $e^{-itH_0}\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$ para tiempos $t > 0$. Lo anterior toma en cuenta que el estado del sistema compuesto nunca este dado exactamente por la función de onda $e^{-itH_0}\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$, si no por estados *cercanos* a esta. A pesar de lo anterior en el teorema 1.5 obtuvimos una expresión para la pureza de $\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$, que no es otra cosa mas que el estado $e^{-itH_0}\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$ al tiempo $t = 0$. Lo natural ahora sería estudiar la pureza de este ultimo estado para $t > 0$.

Proposición 18.6. *La Pureza de un estado libre de un sistema de dos partículas $\varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ ($\mathbf{p}_i \in R^3$), es constante en el tiempo.*

Demostración

Por la ecuación (12.24), tenemos que la pureza del estado φ esta dada por:

$$P(\varphi) = \int_{\mathbb{R}^{12}} \varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \varphi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) \overline{\varphi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2)} \overline{\varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2)} d\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}'_1 \mathbf{p}'_2$$

Cuando el estado φ evoluciona, al tiempo $t \neq 0$, esta dado por $\varphi(t) = e^{-itH_0}\varphi$, en donde como siempre:

$$e^{-itH_0} = \exp \left[-it \left(\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} - \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} \right) \right] = U(t, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$$

Notemos que debido a que nos encontramos en la representación de momentos y el potencial es cero, el operador de evolución es simplemente la multiplicación por un factor de fase complejo.

Luego, la pureza del estado φ al tiempo $t \neq 0$ esta dada por:

$$\begin{aligned} P(\varphi(t)) &= \\ & \int_{\mathbb{R}^{12}} U(t, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) U(t, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) \varphi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) \overline{U(t, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2) \varphi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2)} \overline{U(t, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2) \varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2)} d\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}'_1 \mathbf{p}'_2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^{12}} U(t, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) U(t, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) \overline{U(t, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2)} \overline{U(t, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2)} \varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \varphi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) \overline{\varphi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2)} \overline{\varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2)} d\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}'_1 \mathbf{p}'_2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^{12}} \varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \varphi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) \overline{\varphi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2)} \overline{\varphi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2)} d\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}'_1 \mathbf{p}'_2 = P(\varphi) \end{aligned}$$

En donde usamos:

$$\begin{aligned} & U(t, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) U(t, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) \overline{U(t, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2)} \overline{U(t, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2)} \\ &= \exp \left[-it \left(\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} - \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} \right) - it \left(\frac{(\mathbf{p}'_1)^2}{2m_1} - \frac{(\mathbf{p}'_2)^2}{2m_2} \right) + it \left(\frac{(\mathbf{p}'_1)^2}{2m_1} - \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} \right) + it \left(\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} - \frac{(\mathbf{p}'_2)^2}{2m_2} \right) \right] \\ &= \exp[0] = 1 \end{aligned}$$

Por tanto, $P(\varphi(t)) = P(\varphi) \forall t$. □

Ya que $\varphi_{out, \mathbf{p}_0}$ es un estado libre de un sistema de dos partículas, por el resultado anterior tenemos que:

$$P(\varphi_{out, \mathbf{p}_0}) = \mathbf{p} \left(e^{-itH_0} \varphi_{out, \mathbf{p}_0} \right), \forall t$$

Ahora, supongamos que el estado de nuestro sistema de dispersión esta dado al tiempo $t = 0$ por $\Psi = \Psi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$. De esta forma, el estado del sistema al tiempo $t > 0$ esta dado por:

$$\Psi(t) = e^{-itH} \Psi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$$

En donde H es el Hamiltoniano perturbado del sistema. Ahora hacemos la siguiente observación: Si $\psi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \in L^2(\mathbb{R}^6)$ es un estado cuántico de dos partículas, el cual satisface una cierta ecuación de Schrodinger, con Hamiltoniano $H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + \hat{V}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ Entonces las funciones:

$$\psi^1 = \psi^1(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) = \psi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \cdot \psi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) \quad (18.116)$$

y

$$\psi^2 = \psi^2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) = \psi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2) \cdot \psi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2) \quad (18.117)$$

Están en $L^2(\mathbb{R}^{12})$ y satisfacen las ecuaciones de Schrodinger con Hamiltonianos:

$$H^1 = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + \frac{(\mathbf{p}'_1)^2}{2m_1} + \frac{(\mathbf{p}'_2)^2}{2m_2} + \hat{V}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) + \hat{V}(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) \quad (18.118)$$

y

$$H^2 = \frac{(\mathbf{p}'_1)^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{(\mathbf{p}'_2)^2}{2m_2} + \hat{V}(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2) + \hat{V}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2) \quad (18.119)$$

Respectivamente. Así, su evolución temporal esta dada por:

$$\psi^1(t) = e^{-itH^1} \psi^1 ; \quad \psi^2(t) = e^{-itH^2} \psi^2$$

Luego observamos que la pureza del estado $\psi(t)$ se puede ver como el producto interior de las funciones $\psi^1(t)$ y $\psi^2(t)$ en el espacio $L^2(\mathbb{R}^{12})$:

$$P(\psi(t)) = (\psi^1(t), \psi^2(t))_{L^2(\mathbb{R}^{12})} \quad (18.120)$$

en donde $(\cdot, \cdot)_{L^2(\mathbb{R}^{12})}$ es el producto interior del espacio $L^2(\mathbb{R}^{12})$.

Notamos también que $\|\psi^1\|_{L^2(\mathbb{R}^{12})} = \|\psi^2\|_{L^2(\mathbb{R}^{12})} = 1$.

Ahora, como en las expresiones (18.116) y (18.117), definimos a las funciones de $L^2(\mathbb{R}^{12})$:

$$\Psi^1 = \Psi^1(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) = \Psi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \cdot \Psi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2)$$

$$\Psi^2 = \Psi^2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) = \Psi(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2) \cdot \Psi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2)$$

y

$$\varphi_{out, \mathbf{p}_0}^1 = \varphi_{out, \mathbf{p}_0}^1(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) = \varphi_{out, \mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \cdot \varphi_{out, \mathbf{p}_0}(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2)$$

$$\varphi_{out, \mathbf{p}_0}^2 = \varphi_{out, \mathbf{p}_0}^2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) = \varphi_{out, \mathbf{p}_0}(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}_2) \cdot \varphi_{out, \mathbf{p}_0}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_2)$$

con sus respectivas evoluciones temporales dadas por:

$$\Psi^1(t) = e^{-itH^1} \Psi^1, \quad \Psi^2(t) = e^{-itH^2} \Psi^2$$

$$\varphi_{out, \mathbf{p}_0}^1(t) = e^{-itH_0^1} \varphi_{out, \mathbf{p}_0}^1, \quad \varphi_{out, \mathbf{p}_0}^2(t) = e^{-itH_0^2} \varphi_{out, \mathbf{p}_0}^2$$

Ahora, comparemos la pureza del estado $\Psi(t)$ con la del estado libre asintótico $\varphi_{out, \mathbf{p}_0}^1$. Por la proposición anterior, la expresión (18.120) y la continuidad del producto interno $(\cdot, \cdot)_{L^2(\mathbb{R}^{12})}$, tenemos:

$$\begin{aligned} |P(\varphi_{out, \mathbf{p}_0}) - P(\Psi(t))| &= |P(\varphi_{out, \mathbf{p}_0}(t)) - P(\Psi(t))| = |(\varphi_{out, \mathbf{p}_0}^1(t), \varphi_{out, \mathbf{p}_0}^2(t)) - (\Psi^1(t), \Psi^2(t))| \\ &\leq \|\varphi_{out, \mathbf{p}_0}^1(t) - \Psi^1(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^{12})} + \|\varphi_{out, \mathbf{p}_0}^2(t) - \Psi^2(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^{12})} \rightarrow 0 \end{aligned}$$

cuando $t \rightarrow \infty$, ya que $\Psi(t)$ y $\varphi_{out, \mathbf{p}_0}(t)$ cumplen con la condición asintótica. De esta forma, la pureza del estado del sistema dispersor $\Psi(t)$ puede ser bien aproximada por $P(\varphi_{out, \mathbf{p}_0})$ para tiempos en el futuro remoto.

En el apéndice calculamos de forma explícita los valores $J(1/2, 1/2) = 0.663497$ y $J(1, 0) = 0.32627$. De esta forma por la ecuación (18.114) cuando las masas de las partículas son iguales, el coeficiente de entrelazamiento esta dado por:

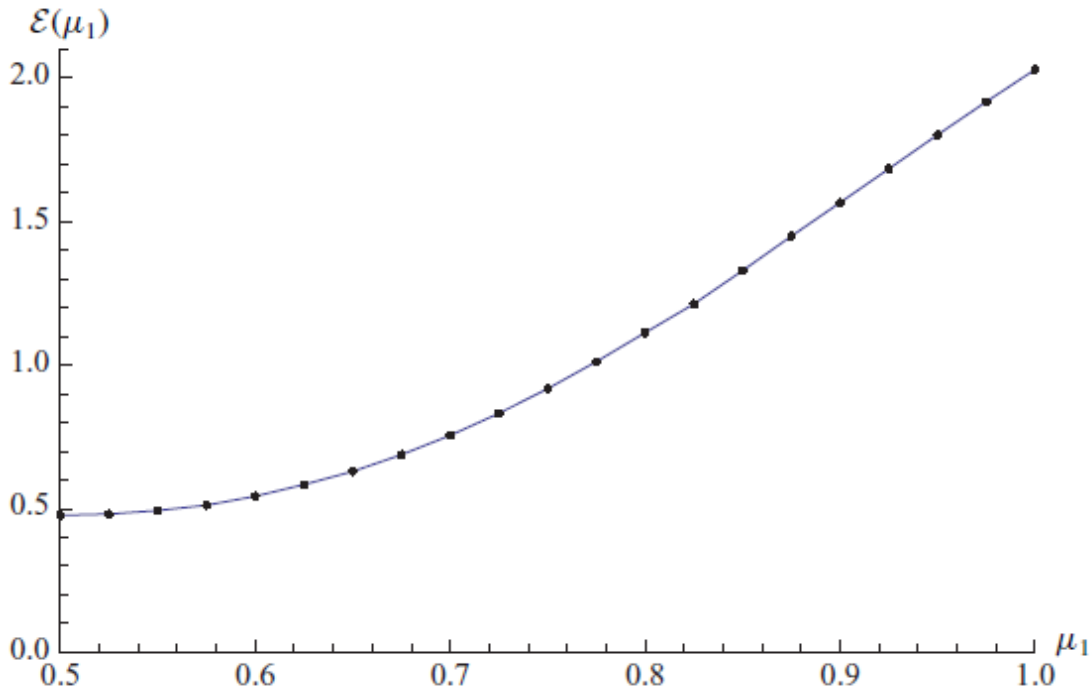
$$\mathcal{E}(1/2) = 0,477$$

Para $\mu_1 \in [0, 1] \setminus \{1/2, 1\}$, calculamos el valor de $J(\mu_1, 1 - \mu_1)$ numéricamente usando cuadraturas gaussianas [18].

En la siguiente tabla y en la grafica 1, damos los valores de $\mathcal{E}(\mu_1)$ para $0.5 \leq \mu_1 \leq 1$.

Tabla 1. El coeficiente de entrelazamiento $\mathcal{E}(\mu_1)$.

$\mu_1 := m_1/(m_1 + m_2)$	$\mathcal{E}(\mu_1)$
0.5	0.4770
0.525	0.4813
0.55	0.4937
0.575	0.5144
0.6	0.5434
0.625	0.5816
0.65	0.6296
0.675	0.6880
0.7	0.7550
0.725	0.8320
0.75	0.9179
0.775	1.0120
0.8	1.1130
0.825	1.2208
0.85	1.3228
0.875	1.4488
0.9	1.5659
0.925	1.6832
0.95	1.8010
0.975	1.9168
1	2.0287



Gráfica 1. (Línea de color) El coeficiente de entrelazamiento $\mathcal{E}(\mu_1)$, como función de $\mu_1 := m_1/(m_1 + m_2)$, para $0.5 \leq \mu_1 \leq 1$.

Comparando los valores de la gráfica anterior con la ecuación (18.115) observamos que la pureza del sistema alcanza su máximo cuando las masas de las partículas son iguales ($\mu_1 = 1/2$), por tanto es en este punto cuando el entrelazamiento del sistema es mínimo.

Debemos notar que en la ecuación (18.115) no hay ningún término de orden σ/\hbar ya que estos se cancelan debido a los complejos conjugados que aparecen en la fórmula de la pureza y por el factor i que aparece en la expansión de la matriz de dispersión del teorema de Kato - Jensen, el cual está ahí debido a que esta matriz es un operador unitario. Lo anterior muestra que en el límite de bajas energías el entrelazamiento es un efecto de segundo orden.

Notemos también que $\mathcal{E}(\mu_1) = \mathcal{E}(1 - \mu_1)$, lo cual implica que el término mayor orden de la ecuación (18.115) es invariante ante el cambio $\mu_1 \leftrightarrow 1 - \mu_1$ como debe de ser, ya que como vimos en el capítulo 12 de la introducción $P(\varphi_{out})$ tiene el mismo valor para las dos partículas del sistema, lo cual también se puede interpretar como la invariancia de la pureza ante el intercambio de las partículas.

Como hemos mencionado, a bajas energías el entrelazamiento es un efecto de segundo orden. En la expansión de la matriz de dispersión del teorema de Kato - Jensen, se puede observar que para bajas energías el fenómeno de dispersión es isotrópico a primer orden y está determinado por la longitud de dispersión c_0 ($\mathcal{S}(\mathbf{p}^2/2\mu) \approx I + i|\mathbf{p}/\hbar| \Sigma_1^0$). Sin embargo, los efectos anisotrópicos del potencial aparecen a segundo orden. Es sorprendente que estos efectos no contribuyan en la evaluación de $N(\mu_1, \mu_2)$. Por lo anterior tenemos que el término de mayor orden del entrelazamiento para bajas energías (ec. (18.115)) está determinado por la longitud de dispersión c_0 y que la anisotropía del potencial no juega ningún papel a pesar de que como hemos mencionado, el entrelazamiento es un efecto de segundo orden.

Conclusiones:

Hemos considerado la creación de entrelazamiento en un proceso de dispersión a baja energía, de dos partículas con masas m_1 y m_2 respectivamente, en tres dimensiones con la interacción dada por un potencial que no es necesariamente simétrico.

Inicialmente las partículas se encuentran en un estado puro, el cual está dado por el producto de dos estados Gaussianos normalizadas, con la misma varianza σ pero con momento promedio opuesto. Medimos el entrelazamiento creado por el proceso de dispersión de las partículas a través de la pureza P del estado de una de estas después de la interacción. Antes del proceso de dispersión cuando las partículas se encuentran muy alejadas, la pureza del sistema es uno. Dimos un cálculo riguroso, con cota de error, del término de mayor orden de la pureza P para bajas energías; A saber, probamos que el término principal de la pureza está dado por:

$$1 - \left(\frac{c_0 \sigma}{\hbar} \right)^2 \mathcal{E}$$

en donde c_0 es la longitud de dispersión y el coeficiente \mathcal{E} solo depende de la masa de las partículas. Así también, probamos que el entrelazamiento es mínimo cuando las masas son iguales y que este crece rápidamente conforme la diferencia de las masas aumenta. Como hicimos notar anteriormente, no hay términos de orden σ/\hbar en el término principal de la pureza, lo cual muestra que para bajas energías el entrelazamiento es un fenómeno de segundo orden. Aunque los efectos de la anisotropía del potencial aparecen a segundo orden en el límite de bajas energías, se encontró que estos efectos no tienen ninguna contribución en el término principal de la pureza y por tanto, la anisotropía del potencial no juega ningún papel en este desarrollo, a pesar del hecho de que el entrelazamiento es un efecto de segundo orden.

Parte III

Apéndice

Apéndice A

Introducción de \hbar y m en el teorema de Kato - Jensen

En el teorema de Kato-Jensen, el cual se puede encontrar en el artículo (*ref.K - J*), se da una expansión para la matriz de dispersión en el espacio de configuración de momentos en términos de operadores de rango finito. Este teorema se desarrolla en unidades en las cuales el Hamiltoniano de la ecuación de Schrödinger tienen la forma:

$$H = -\Delta + Q$$

en donde Q es un potencial que satisface la suposición 1, que se da en el capítulo 17 de la introducción. Así, en estas unidades los operadores de onda Ω_{\pm} se definen como:

$$s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{-it(-\Delta+Q)} e^{it\Delta}$$

y ya que estos operadores tienen el mismo significado que en las secciones 14 y 15 de la introducción, el operador de dispersión \mathcal{S} , está dado por:

$$\mathcal{S} = \Omega_+^* \Omega_-$$

En estas unidades la *longitud de dispersión* se define como:

$$c_0 = \frac{1}{4\pi} (Q(1 - G_0 Q)^{-1} 1, 1) \quad (\text{A.1})$$

en donde G_0 es el operador integral cuyo núcleo es la función de Green a energía cero del Hamiltoniano. De esta forma las funciones $Y_0(w)$ y $Y_1(w)$ quedan definidas como:

$$Y_0(w) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

y

$$Y_1(w) = \frac{1}{4\pi^{3/2}} (Q(1 + G_0 Q)^{-1} 1, x \cdot w) \quad (\text{A.2})$$

Para $w \in S^2$ y $x \in \mathbb{R}^3$.

De esta forma, el teorema de Kato - Jensen da la siguiente expansión de la matriz de dispersión, para $\beta > 5$:

$$S(\lambda) = I + i\lambda^{1/2}\Sigma_1^0 - \lambda\Sigma_2^0 + o(\lambda) \quad (\text{A.3})$$

si $\beta > 7$ se puede reemplazar $o(\lambda)$ por $O(\lambda^{3/2})$.

En este caso, la transformada de Fourier y su inversa están dadas en $L^2(\mathbb{R}^3)$ por:

$$\mathcal{F}\varphi = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \varphi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

$$\mathcal{F}^{-1}\hat{\varphi} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) d\mathbf{q}$$

Así, el operador de dispersión en el espacio de momentos respecto a la transformada de Fourier anterior esta dado por:

$$\hat{\mathcal{S}} = \mathcal{F} \mathcal{S} \mathcal{F}^{-1} \quad (\text{A.4})$$

Luego, sabemos que \mathcal{S} se puede descomponer en términos de operadores sobre el espacio de Hilbert $L^2(S^2)$ de donde obtenemos la matriz de dispersión:

$$\hat{\mathcal{S}} = \{\mathcal{S}(\lambda)\}$$

En donde $\mathcal{S}(\lambda) : L^2(S^2) \rightarrow L^2(S^2)$, para cada $\lambda \in [0, \infty)$. De esta manera podemos representar a $\hat{\mathcal{S}}$ de forma integral como:

$$\hat{\mathcal{S}}\varphi(\mathbf{q}) = \int_{S^2} \rho(\lambda, w, w') \varphi(\lambda^{1/2}w') dw' \quad (\text{A.5})$$

con $w \in S^2$, $\lambda = |\mathbf{q}|^2$ y $\mathbf{q} = \lambda^{1/2}w$.

El desarrollo anterior se puede entender como el caso en el que toma $\hbar = 1$ y $m = 1/2$.

Por otro lado, tomemos al Hamiltoniano de la ecuación de Schrödinger en las unidades físicas convencionales:

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

en donde $V(\mathbf{x})$ es un potencial que satisface la condición 1 que se da en el capítulo 17 de la introducción. Luego, este Hamiltoniano se puede escribir como:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m}(-\Delta + Q(\mathbf{x}))$$

en donde $Q := \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{x})$, y ya que solo tiene un factor constante extra esta función sigue cumpliendo la condición sobre el potencial. El Hamiltoniano libre (o no perturbado) esta dado por:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

De esta forma, definimos a los operadores de onda W_{\pm} como:

$$W_{\pm} = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{i\frac{t}{\hbar}H} e^{-i\frac{t}{\hbar}H_0}$$

Sin embargo observamos que:

$$\begin{aligned} W_{\pm} &= s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \exp\left(i\frac{t}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}(-\Delta + Q)\right) \exp\left(i\frac{t}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right) \\ &= s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \exp\left(it\frac{\hbar}{2m}(-\Delta + Q)\right) \exp\left(it\frac{\hbar}{2m}\Delta\right) \end{aligned}$$

$$= s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \exp(it(-\Delta + Q)) \exp(it\Delta) = \Omega_{\pm}$$

Luego observamos que el operador de dispersión esta dado por:

$$\mathcal{S} = W_+^* W_- = \Omega_+^* \Omega_- \quad (\text{A.6})$$

Ahora, denotaremos a la transformada de Fourier y a su inversa en estas unidades como:

$$\mathcal{F}_h(\varphi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \mathbf{x}} \varphi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

$$\mathcal{F}_h^{-1}(\hat{\varphi}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \mathbf{x}} \hat{\varphi}(\mathbf{p}) d\mathbf{p}$$

a \mathcal{F}_h se le conoce también como la transformada de Fourier física en $L^2(\mathbb{R}^3)$ ya que esta toma en cuenta a la constante \hbar .

Para $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)$, denotamos a su transformada de Fourier física como:

$$\varphi_M(\mathbf{p}) = (\mathcal{F}_h \varphi)(\mathbf{p})$$

Ahora definimos a $E = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m}$ y hacemos el cambio de coordenadas $\mathbf{p} \rightarrow (E, w)$ en donde $w \in S^2$. Este cambio lo hacemos a través del operador unitario $U : L^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow L^2([0, \infty), L^2(S^2))$. Así definimos:

$$\varphi_{\xi}(E, w) = (U\varphi_M)(E, w)$$

en donde U actúa de la forma:

$$(U\varphi_M)(E, w) = m^{1/2}(2mE)^{1/4} \varphi_M\left(\sqrt{2mE} w\right)$$

Para probar que U es efectivamente un operador unitario basta ver que $U^* = U^{-1}$. Para hacer esto primero debemos de encontrar como actúa U^* . Tomemos a $\varphi, \psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$, luego:

$$\begin{aligned} (U^* \varphi, \psi) &= (\varphi, U\psi) = \int_0^{\infty} \int_{S^2} \varphi(E, w) m^{1/2} (2mE)^{1/4} \bar{\psi}\left(\sqrt{2mE} w\right) dw dE \\ &= \int_0^{\infty} \int_{S^2} \varphi\left(\frac{|\mathbf{p}|^2}{2m}, w\right) \bar{\psi}(|\mathbf{p}|w) m^{1/2} |\mathbf{p}|^{1/2} \frac{|\mathbf{p}|}{m} dw d|\mathbf{p}| \\ &= \int_0^{\infty} \int_{S^2} \left[\frac{1}{m^{1/2}} \frac{1}{|\mathbf{p}|^{1/2}} \varphi\left(\frac{|\mathbf{p}|^2}{2m}, w\right) \right] \bar{\psi}(|\mathbf{p}|w) |\mathbf{p}|^2 dw d|\mathbf{p}| \end{aligned}$$

lo anterior implica que:

$$U^* \varphi(\mathbf{p}) = \frac{1}{m^{1/2}} \frac{1}{|\mathbf{p}|^{1/2}} \varphi\left(\frac{|\mathbf{p}|^2}{2m}, w\right)$$

Luego,

$$U^* U \varphi = U^* m^{1/2} (2mE)^{1/4} \varphi(\sqrt{2mE} w) = \frac{m^{1/2} |\mathbf{p}|^{1/2}}{m^{1/2} |\mathbf{p}|^{1/2}} \varphi(\sqrt{2mE} w) = \varphi(\mathbf{p})$$

por tanto U es unitario.

En las coordenadas (E, w) la matriz de dispersión esta dada por:

$$(U F_h \mathcal{S} F_h^{-1} U^{-1})(\varphi_{\xi})(E, w) = (U S_M U^{-1})(\varphi_{\xi})(E, w) = \mathcal{S}_{\xi}(E) \varphi_{\xi}(E, w)$$

en donde introducimos a $S_M = F_\hbar \mathcal{S} F_\hbar^{-1}$. Es claro que, $\mathcal{S}_\xi(E) : L^2(S^2) \rightarrow L^2(S^2)$, para toda $E \in [0, \infty)$. Luego, $\mathcal{S}_\xi(E)$, se puede representar de forma integral como:

$$\mathcal{S}_\xi(E) \varphi_\xi(E, w) = \int_{S^2} \mathcal{S}(E, w, w') \varphi_\xi(E, w') dw'$$

Ahora en la representación de momentos, calculemos $\mathcal{S}_M \varphi_M$:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_M \varphi_M &= U^{-1}(\mathcal{S}_\xi)U \varphi_M = U^{-1} \mathcal{S}_\xi m^{1/2} (2mE)^{1/4} \varphi_M(\sqrt{2mE}w) \\ &= U^{-1} \int_{S^2} \mathcal{S}(E, w, w') m^{1/2} (2mE)^{1/4} \varphi_M(\sqrt{2mE}w') dw' \\ &= \int_{S^2} \mathcal{S}\left(\frac{|\mathbf{p}|^2}{2m}, w, w'\right) \varphi_M(|\mathbf{p}|w') dw' \end{aligned}$$

de esta forma tenemos que:

$$\mathcal{S}_M \varphi_M(\mathbf{p}) = \int_{S^2} \mathcal{S}\left(\frac{|\mathbf{p}|^2}{2m}, w, w'\right) \varphi_M(|\mathbf{p}|w') dw' \quad (\text{A.7})$$

Ahora, comparemos lo anterior con el operador de dispersión del teorema de Kato - Jensen, con núcleo integral $\rho(\lambda, w, w')$, en el caso $\hbar = 1$ y $m = 1/2$.

La ecuación (A.4), implica que $\mathcal{S} = \mathcal{F}^{-1} \hat{\mathcal{S}} \mathcal{F}$. Tomando esto, el hecho de que $\varphi = \mathcal{F}_\hbar^{-1} \varphi_M$ y la ecuación (A.5), tenemos que:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_M \varphi_M &= \mathcal{F}_\hbar \mathcal{S} \mathcal{F}_\hbar^{-1} \mathcal{F}_\hbar \varphi = \mathcal{F}_\hbar \mathcal{S} \varphi = \mathcal{F}_\hbar \mathcal{F}^{-1}(\hat{\mathcal{S}} \mathcal{F} \varphi) = \mathcal{F}_\hbar \mathcal{F}^{-1} \hat{\mathcal{S}} \hat{\varphi} \\ &= \mathcal{F}_\hbar \mathcal{F}^{-1} \int_{S^2} \rho(|\mathbf{p}|^2, w, w') \hat{\varphi}(|\mathbf{p}|w') dw' \end{aligned}$$

Lo anterior e puede hacer sin ninguna ambigüedad por la equivalencia que se expresa en (A.6). Calculemos ahora $\mathcal{F}_\hbar \mathcal{F}^{-1} \hat{\psi}$, para $\hat{\psi} \in L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$\mathcal{F}_\hbar \mathcal{F}^{-1} \hat{\psi} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \mathbf{x}} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \hat{\psi}(q) d\mathbf{q} d\mathbf{x} = \frac{1}{\hbar^{3/2}} \hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\right)$$

de esta forma, tomando el hecho de que $\hat{\varphi}\left(\frac{|\mathbf{p}|}{\hbar}w'\right) = \varphi_M(|\mathbf{p}|w')$, tenemos que:

$$\mathcal{S}_M \varphi_M = \int_{S^2} \rho\left(\frac{|\mathbf{p}|^2}{\hbar^2}, w, w'\right) \varphi_M(|\mathbf{p}|w') dw'$$

luego, por la ecuación (A.7), tenemos que:

$$\rho\left(\frac{|\mathbf{p}|^2}{\hbar^2}, w, w'\right) = \mathcal{S}\left(\frac{|\mathbf{p}|^2}{2m}, w, w'\right) = \rho(\lambda, w, w')$$

De esta forma, sustituyendo λ por $\frac{|\mathbf{p}|^2}{\hbar^2}$ y Q por $\frac{2m}{\hbar^2}V$, en las ecuaciones (17.17), (A.2) y (A.3), obtenemos:

$$c_0 = \frac{-1}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} V \left(1 - \frac{2m}{\hbar^2} G_0 V \right)^{-1} 1, 1 \right)$$

$$Y_1(w) = \frac{-1}{(4\pi)^{3/2}} \left(\frac{2m}{\hbar^2} V \left(1 + \frac{2m}{\hbar} G_0 V \right)^{-1} 1, \mathbf{x} \cdot w \right)$$

$$\mathcal{S} \left(\left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right|^2 \right) = I + i \left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right| \Sigma_1^0 - \left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right|^2 \Sigma_2^0 + o(|\mathbf{p}/\hbar|^2), \text{ para } \beta > 5$$

$$\mathcal{S} \left(\left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right|^2 \right) = I + i \left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right| \Sigma_1^0 - \left| \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right|^2 \Sigma_2^0 + O(|\mathbf{p}/\hbar|^3), \text{ para } \beta > 7$$

Apéndice B

Integrales elementales

En el resto de este apéndice estableceremos, por medio de cálculo explícito, algunos resultados que se utilizan en el capítulo de creación de entrelazamiento, a saber calcularemos las integrales $L(\mu_1, 1 - \mu)$, $N(\mu_1, 1 - \mu)$. De esta misma forma obtendremos los valores $J(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ y $J(1, 0)$. Para esto, establecemos primero las siguientes integrales elementales:

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad a > 0 \quad (\text{B.1})$$

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^2} x^2 dx = \frac{1}{4a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad a > 0 \quad (\text{B.2})$$

La siguiente integral se sigue directamente de (B.2) integrando por partes usando el hecho de que, $xe^{-ax^2} = \frac{d}{dx} \left[\frac{-1}{2a} e^{-ax^2} \right]$,

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^2} x^4 dx = \frac{3}{8} \frac{\sqrt{\pi}}{a^{5/2}}, \quad a > 0 \quad (\text{B.3})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2 - 2bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/a}, \quad a > 0 \quad (\text{B.4})$$

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^2 - 2bx} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/a} [1 - \text{erf}(b/\sqrt{a})], \quad a > 0 \quad (\text{B.5})$$

$$\int_0^{\infty} x e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a} \quad (\text{B.6})$$

$$\int_0^{\pi} e^{-a \cos(\theta)} \text{sen}(\theta) d\theta = 2 \frac{\text{senh}(a)}{a}, \quad a > 0 \quad (\text{B.7})$$

En donde, $\text{erf}(x)$ es la función error:

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy \quad (\text{B.8})$$

Con la propiedad,

$$\text{erf}^2(x) = 1 - \frac{4}{\pi} \int_0^1 \frac{e^{-x^2(y^2+1)}}{y^2+1} dy \quad (\text{B.9})$$

Así también introducimos las siguientes integrales indefinidas:

$$\int \frac{1}{(1+x^2)\sqrt{2+x^2}} dx = \arctan\left(\frac{1}{x}\right) + \arctan\left(\frac{x}{2-\sqrt{2+x^2}}\right) + C \quad (\text{B.10})$$

$$\int \frac{1}{(1+x^2)(2+x^2)^{3/2}} dx = \arctan\left(\frac{x}{\sqrt{2+x^2}}\right) - \frac{x}{2\sqrt{2+x^2}} + C \quad (\text{B.11})$$

$$\int \frac{1}{(1+x^2)(2+x^2)^{5/2}} dx = \arctan\left(\frac{x}{\sqrt{2+x^2}}\right) - \frac{x(4x^2+9)}{6(2+x^2)^{3/2}} + C \quad (\text{B.12})$$

Apéndice C

Cálculo de $L(\mu_1, 1 - \mu_1)$

Primero, en las coordenadas $\mathbf{q} - \mathbf{q}_{cm}$, $L(\mu_1, \mu_2)$ está dada por:

$$L(\mu_1, \mu_2) = \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{q}| \exp [-(\mu_1^2 + \mu_2^2) |\mathbf{q}_{cm}|^2 - 2 |\mathbf{q}|^2] \cdot \exp [-(\mu_1 - \mu_2) \mathbf{q}_{cm} \cdot \mathbf{q}] \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot |\mathbf{q}|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot |\mathbf{q}|} d\mathbf{q} d\mathbf{q}_{cm} \quad (\text{C.1})$$

y denotamos por,

$$I_1(\mathbf{q}_{cm}, \mu_1, \mu_2) := \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{q}| \exp [-(\mu_1^2 + \mu_2^2) |\mathbf{q}_{cm}|^2 - 2 |\mathbf{q}|^2] \cdot \exp [-(\mu_1 - \mu_2) \mathbf{q}_{cm} \cdot \mathbf{q}] \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot |\mathbf{q}|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot |\mathbf{q}|} d\mathbf{q} \quad (\text{C.2})$$

Es claro que,

$$L(\mu_1, \mu_2) = \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} I_1(\mathbf{q}_{cm}, \mu_1, \mu_2) d\mathbf{q}_{cm} \quad (\text{C.3})$$

Haciendo el cambio a coordenadas esféricas $\mathbf{q} \rightarrow (\lambda, \theta, \phi)$ en un sistema de referencia en el que el eje z es paralelo al vector \mathbf{q}_{cm} , tenemos que por la ecuación (B.7),

$$\begin{aligned} I_1(\mathbf{q}_{cm}, \mu_1, \mu_2) &= \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \lambda \exp [-(\mu_1^2 + \mu_2^2) |\mathbf{q}_{cm}|^2 - 2 \lambda^2 - (\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \lambda \cos(\theta)] \\ &\quad \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot \lambda]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot \lambda} \lambda^2 \sin(\theta) d\theta d\phi d\lambda \\ &= 2\pi \int_0^\infty \lambda \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot \lambda]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot \lambda} e^{-(\mu_1^2 + \mu_2^2) |\mathbf{q}_{cm}|^2 - 2\lambda^2} \left[\int_0^\pi e^{-(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \lambda \cos(\theta)} \sin(\theta) d\theta \right] \lambda^2 d\lambda \\ &= 4\pi \int_0^\infty \lambda \left[\frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot \lambda]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}|} \right]^2 \exp [-(\mu_1^2 + \mu_2^2) |\mathbf{q}_{cm}|^2 - 2\lambda^2] d\lambda \quad (\text{C.4}) \end{aligned}$$

Sustituyendo (C.4) en la ecuación (C.3) desarrollando el termino cuadrático obtenemos,

$$L(\mu_1, \mu_2) = \frac{4}{\pi^2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \frac{\lambda \exp [-(\mu_1^2 + \mu_2^2) \mathbf{q}_{cm}^2 - 2\lambda^2]}{(\mu_1 - \mu_2)^2 |\mathbf{q}_{cm}|^2} \left[\frac{\cosh [2(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \lambda]}{2} - \frac{1}{2} \right] d\lambda d\mathbf{q}_{cm}$$

Haciendo el cambio a coordenadas esféricas $\mathbf{q}_{cm} \rightarrow (\rho, \hat{\theta}, \hat{\phi})$ e integrando la parte angular, obtenemos:

$$\begin{aligned} L(\mu_1, \mu_2) &= \frac{16}{\pi} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{\lambda \exp[-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\mathbf{q}_{cm}^2 - 2\lambda^2]}{(\mu_1 - \mu_2)^2 |\mathbf{q}_{cm}|^2} \left[\frac{\cosh[2(\mu_1 - \mu_2)\rho\lambda]}{2} - \frac{1}{2} \right] d\rho d\lambda \\ &= \frac{16}{\pi(\mu_1 - \mu_2)^2} \int_0^\infty \lambda e^{-2\lambda^2} \int_0^\infty e^{-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2} \left[\frac{\cosh[2(\mu_1 - \mu_2)\rho\lambda]}{2} - \frac{1}{2} \right] d\rho d\lambda \\ &= \frac{16}{\pi(\mu_1 - \mu_2)^2} \int_0^\infty \lambda e^{-2\lambda^2} I_2(\lambda, \mu_1, \mu_2) d\lambda \end{aligned} \quad (C.5)$$

en donde,

$$I_2(\lambda, \mu_1, \mu_2) := \int_0^\infty e^{-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2} \left[\frac{\cosh[2(\mu_1 - \mu_2)\rho\lambda]}{2} - \frac{1}{2} \right] d\rho$$

Desarrollando a $I_2(\lambda, \mu_1, \mu_2)$ en términos de exponenciales, obtenemos:

$$\begin{aligned} I_2(\lambda, \mu_1, \mu_2) &= \frac{1}{4} \int_0^\infty \exp[-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2 + 2(\mu_1 - \mu_2)\rho\lambda] d\rho \\ &+ \frac{1}{4} \int_0^\infty \exp[-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2 - 2(\mu_1 - \mu_2)\rho\lambda] d\rho - \frac{1}{2} \int_0^\infty \exp[-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2] d\rho \end{aligned} \quad (C.6)$$

Luego observamos que,

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \int_0^\infty \exp[-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2 + 2(\mu_1 - \mu_2)\rho\lambda] d\rho &= \frac{1}{4} \int_{-\infty}^0 \exp[-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2 - 2(\mu_1 - \mu_2)\rho\lambda] d\rho \\ \frac{1}{2} \int_0^\infty \exp[-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2] d\rho &= \frac{1}{4} \int_{-\infty}^\infty \exp[-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2] d\rho \end{aligned}$$

Sustituyendo en (C.6) obtenemos,

$$I_2(\lambda, \mu_1, \mu_2) = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^\infty \exp[-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2 - 2(\mu_1 - \mu_2)\rho\lambda] - \exp[-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2] d\rho$$

de esta forma, por las ecuaciones (B.1) y (B.4) obtenemos que,

$$I_2(\lambda, \mu_1, \mu_2) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\mu_1^2 + \mu_2^2}} \left[\exp \left[\frac{(\mu_1 - \mu_2)^2 \lambda^2}{\mu_1^2 + \mu_2^2} \right] - 1 \right] \quad (C.7)$$

Sustituyendo (C.7) en la ecuación (C.5) obtenemos,

$$L(\mu_1, \mu_2) = \frac{4}{(\mu_1 - \mu_2)^2 \sqrt{\pi(\mu_1^2 + \mu_2^2)}} \int_0^\infty \lambda e^{-2\lambda^2} \left[\exp \left[\frac{(\mu_1 - \mu_2)^2 \lambda^2}{\mu_1^2 + \mu_2^2} \right] - 1 \right] d\lambda$$

y por la ecuación (B.6) tenemos que

$$L(\mu_1, \mu_2) = \frac{4}{(\mu_1 - \mu_2)^2 \sqrt{\pi(\mu_1^2 + \mu_2^2)}} \left[\frac{1}{2} \left(2 - \frac{(\mu_1 - \mu_2)^2}{\mu_1^2 + \mu_2^2} \right)^{-1} - \frac{1}{4} \right]$$

desarrollando términos cuadráticos y utilizando el hecho de que $\mu_1 + \mu_2 = 1$ es fácil ver que,

$$\frac{1}{2} \left(2 - \frac{(\mu_1 - \mu_2)^2}{\mu_1^2 + \mu_2^2} \right)^{-1} = \frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{2}$$

Así obtenemos,

$$L(\mu_1, \mu_2) = \frac{2\mu_1^2 + 2\mu_2^2 - 1}{(\mu_1 - \mu_2)^2 \sqrt{\pi(\mu_1^2 + \mu_2^2)}}$$

Más aun, usando el hecho de que $\mu_2 = 1 - \mu_1$ y desarrollando los términos cuadráticos tenemos que,

$$2\mu_1^2 + 2\mu_2^2 - 1 = (\mu_1 - \mu_2)^2 = 4\mu_1^2 - 4\mu_1 + 1$$

y que,

$$\mu_1^2 + \mu_2^2 = 2\mu_1^2 - 2\mu_1 + 1 = \left(\sqrt{2}\mu_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2} [(2\mu_1 - 1)^2 + 1]$$

y de esta forma obtenemos,

$$L(\mu_1, 1 - \mu_1) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} [(2\mu_1 - 1)^2 + 1]^{-1/2}$$

Apéndice D

Cálculo de $N(\mu_1, 1 - \mu_1)$

Primero, en las coordenadas $\mathbf{q} - \mathbf{q}_{cm}$, $N(\mu_1, \mu_2)$ está dada por:

$$N(\mu_1, \mu_2) = \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{q}|^2 \exp [-(\mu_1^2 + \mu_2^2) |\mathbf{q}_{cm}|^2 - 2 |\mathbf{q}|^2] \cdot \exp [-(\mu_1 - \mu_2) \mathbf{q}_{cm} \cdot \mathbf{q}] \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot |\mathbf{q}|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot |\mathbf{q}|} d\mathbf{q} d\mathbf{q}_{cm} \quad (\text{D.1})$$

y denotamos por,

$$I_1(\mathbf{q}_{cm}, \mu_1, \mu_2) := \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{q}|^2 \exp [-(\mu_1^2 + \mu_2^2) |\mathbf{q}_{cm}|^2 - 2 |\mathbf{q}|^2] \cdot \exp [-(\mu_1 - \mu_2) \mathbf{q}_{cm} \cdot \mathbf{q}] \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot |\mathbf{q}|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot |\mathbf{q}|} d\mathbf{q} \quad (\text{D.2})$$

Es claro que,

$$N(\mu_1, \mu_2) = \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} I_1(\mathbf{q}_{cm}, \mu_1, \mu_2) d\mathbf{q}_{cm} \quad (\text{D.3})$$

Haciendo el cambio a coordenadas esféricas $\mathbf{q} \rightarrow (\lambda, \theta, \phi)$ en un sistema de referencia en el que el eje z es paralelo al vector \mathbf{q}_{cm} , tenemos que por la ecuación (B.7),

$$\begin{aligned} I_1(\mathbf{q}_{cm}, \mu_1, \mu_2) &= \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \lambda^2 \exp [-(\mu_1^2 + \mu_2^2) |\mathbf{q}_{cm}|^2 - 2\lambda^2 - (\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \lambda \cos(\theta)] \\ &\quad \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot \lambda]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot \lambda} \lambda^2 \sin(\theta) d\theta d\phi d\lambda \\ &= 2\pi \int_0^\infty \lambda^2 \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot \lambda]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot \lambda} e^{-(\mu_1^2 + \mu_2^2) |\mathbf{q}_{cm}|^2 - 2\lambda^2} \left[\int_0^\pi e^{-(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \lambda \cos(\theta)} \sin(\theta) d\theta \right] \lambda^2 d\lambda \\ &= 4\pi \int_0^\infty \lambda^2 \left[\frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \cdot \lambda]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}|} \right]^2 \exp [-(\mu_1^2 + \mu_2^2) |\mathbf{q}_{cm}|^2 - 2\lambda^2] d\lambda \quad (\text{D.4}) \end{aligned}$$

Sustituyendo (D.4) en la ecuación (D.3) desarrollando el termino cuadrático obtenemos,

$$N(\mu_1, \mu_2) = \frac{4}{\pi^2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \frac{\lambda^2 \exp [-(\mu_1^2 + \mu_2^2) \mathbf{q}_{cm}^2 - 2\lambda^2]}{(\mu_1 - \mu_2)^2 |\mathbf{q}_{cm}|^2} \left[\frac{\cosh[2(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_{cm}| \lambda]}{2} - \frac{1}{2} \right] d\lambda d\mathbf{q}_{cm}$$

Haciendo el cambio a coordenadas esféricas $\mathbf{q}_{cm} \rightarrow (\rho, \hat{\theta}, \hat{\phi})$ e integrando la parte angular, obtenemos:

$$\begin{aligned}
N(\mu_1, \mu_2) &= \frac{16}{\pi} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{\lambda^2 \exp[-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\mathbf{q}_{cm}^2 - 2\lambda^2]}{(\mu_1 - \mu_2)^2 |\mathbf{q}_{cm}|^2} \left[\frac{\cosh[2(\mu_1 - \mu_2)\rho\lambda]}{2} - \frac{1}{2} \right] d\rho d\lambda \\
&= \frac{16}{\pi(\mu_1 - \mu_2)^2} \int_0^\infty \lambda^2 e^{-2\lambda^2} \int_0^\infty e^{-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2} \left[\frac{\cosh[2(\mu_1 - \mu_2)\rho\lambda]}{2} - \frac{1}{2} \right] d\rho d\lambda \\
&= \frac{16}{\pi(\mu_1 - \mu_2)^2} \int_0^\infty \lambda^2 e^{-2\lambda^2} I_2(\lambda, \mu_1, \mu_2) d\lambda
\end{aligned} \tag{D.5}$$

en donde,

$$I_2(\lambda, \mu_1, \mu_2) := \int_0^\infty e^{-(\mu_1^2 + \mu_2^2)\rho^2} \left[\frac{\cosh[2(\mu_1 - \mu_2)\rho\lambda]}{2} - \frac{1}{2} \right] d\rho$$

y observamos que este término es el mismo que aparece en el desarrollo de $L(\mu_1, 1 - \mu_1)$,

$$I_2(\lambda, \mu_1, \mu_2) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\mu_1^2 + \mu_2^2}} \left[\exp \left[\frac{(\mu_1 - \mu_2)^2 \lambda^2}{\mu_1^2 + \mu_2^2} \right] - 1 \right]$$

Sustituyendo (C.7) en la ecuación (D.5) obtenemos,

$$\begin{aligned}
N(\mu_1, \mu_2) &= \frac{4}{(\mu_1 - \mu_2)^2 \sqrt{\pi(\mu_1^2 + \mu_2^2)}} \int_0^\infty \lambda^2 e^{-2\lambda^2} \left[\exp \left[\frac{(\mu_1 - \mu_2)^2 \lambda^2}{\mu_1^2 + \mu_2^2} \right] - 1 \right] d\lambda \\
&= \frac{4}{(\mu_1 - \mu_2)^2 \sqrt{\pi(\mu_1^2 + \mu_2^2)}} \left(\int_0^\infty \lambda^2 \exp \left[\frac{(\mu_1 - \mu_2)^2 \lambda^2}{\mu_1^2 + \mu_2^2} \right] d\lambda - \int_0^\infty \lambda^2 e^{-2\lambda^2} d\lambda \right)
\end{aligned}$$

utilizando el hecho de que $\mu_2 = 1 - \mu_1$ y desarrollando términos cuadráticos, es fácil ver que,

$$\frac{(\mu_1 - \mu_2)^2}{\mu_1^2 + \mu_2^2} - 2 = \frac{-1}{\mu_1^2 - \mu_2^2}$$

Así podemos reescribir a $N(\mu_1, \mu_2)$,

$$N(\mu_1, \mu_2) = \frac{4}{(\mu_1 - \mu_2)^2 \sqrt{\pi(\mu_1^2 + \mu_2^2)}} \left(\int_0^\infty \lambda^2 \exp \left[\frac{-\lambda^2}{\mu_1^2 - \mu_2^2} \right] d\lambda - \int_0^\infty \lambda^2 e^{-2\lambda^2} d\lambda \right)$$

Luego, por la ecuación (B.2)

$$\begin{aligned}
N(\mu_1, \mu_2) &= \frac{4}{(\mu_1 - \mu_2)^2 \sqrt{\pi(\mu_1^2 + \mu_2^2)}} \left[\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{4} \sqrt{\pi(\mu_1^2 + \mu_2^2)} - \frac{1}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \right] \\
&= \frac{1}{(\mu_1 - \mu_2)^2} \frac{1}{\sqrt{\mu_1^2 + \mu_2^2}} \left[(\mu_1^2 + \mu_2^2)^{3/2} - \frac{1}{\sqrt{8}} \right]
\end{aligned}$$

utilizando el hecho $\mu_2 = 1 - \mu_1$ y desarrollando términos cuadráticos tenemos que,

$$N(\mu_1, 1 - \mu_1) = \frac{1}{2(2\mu_1 - 1)^2} \frac{1}{\sqrt{1 + (2\mu_1 - 1)^2}} \left[[(2\mu_1 - 1)^2 + 1]^{3/2} - 1 \right]$$

Apéndice E

Cálculo de $J\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$

Primero, $J(\mu_1, \mu_2)$ está dada por,

$$J(\mu_1, \mu_2) = \frac{1}{\pi^{9/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2| \exp \left[-\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{2} |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^2 - |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|^2 - \frac{|\mathbf{q}_1|^2}{2} \right] \cdot \frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|} d\mathbf{q}_1 \right]^2 d\mathbf{q}_2 \quad (\text{E.1})$$

con $0 \leq \mu_1 \leq 1$ y $\mu_2 = 1 - \mu_1$. Luego tenemos que,

$$J(1/2, 1/2) = \frac{1}{\pi^{9/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2| \exp \left[-\frac{1}{4} |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^2 - \frac{1}{4} |\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|^2 - \frac{|\mathbf{q}_1|^2}{2} \right] \cdot \lim_{(\mu_1 - \mu_2) \rightarrow 0} \left[\frac{\sinh [(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|]}{(\mu_1 - \mu_2) |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|} \right] d\mathbf{q}_1 \right]^2 d\mathbf{q}_2 \quad (\text{E.2})$$

Haciendo $x = (\mu_1 - \mu_2)$ y $\mathbf{A} = |\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mu_2 \mathbf{q}_1 - \mu_1 \mathbf{q}_2|$, tenemos por la regla de L'Hopital,

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sinh(x\mathbf{A})}{x\mathbf{A}} = \frac{\mathbf{A} \cosh(x\mathbf{A})}{\mathbf{A}} \Big|_{x=0} = 1 \quad (\text{E.3})$$

Luego, por la ley del paralelogramo tenemos que,

$$-\frac{1}{4} (|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^2 + |\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|^2) = -\frac{1}{2} (|\mathbf{q}_1|^2 + |\mathbf{q}_2|^2) \quad (\text{E.4})$$

Así, sustituyendo las ecuaciones (E.3) y (E.4) en la ecuación (E.2) obtenemos,

$$J(1/2, 1/2) = \frac{1}{\pi^{9/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|}{2} \exp \left[-|\mathbf{q}_1|^2 - \frac{|\mathbf{q}_2|^2}{2} \right] d\mathbf{q}_1 \right]^2 d\mathbf{q}_2 \\ = \frac{1}{4\pi^{9/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-|\mathbf{q}_2|^2} \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2| e^{-|\mathbf{q}_1|^2} d\mathbf{q}_1 \right]^2 d\mathbf{q}_2 \quad (\text{E.5})$$

denotando a $g(\mathbf{q}_2)$ como,

$$g(\mathbf{q}_2) = \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2| e^{-|\mathbf{q}_1|^2} d\mathbf{q}_1 \quad (\text{E.6})$$

podemos reescribir a (E.5) de la forma,

$$J(1/2, 1/2) = \frac{1}{4\pi^{9/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-|\mathbf{q}_2|^2} g^2(\mathbf{q}_2) d\mathbf{q}_2 \quad (\text{E.7})$$

En la siguiente sección realizamos el cálculo de $g(\mathbf{q}_2)$.

E.1. Cálculo de $g(\mathbf{q}_2)$

Primero, tomemos un sistema de referencia en \mathbb{R}^3 tal que el vector \mathbf{q}_2 sea paralelo al eje z y este dado en coordenadas cartesianas por $\mathbf{q}_2 = (0, 0, q_2)$, es claro que $|\mathbf{q}_2| = q_2$. Denotamos por $\mathbf{q}_0 := \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2$ y es claro que,

$$|\mathbf{q}_1|^2 = (\mathbf{q}_0 + \mathbf{q}_2) \cdot (\mathbf{q}_0 + \mathbf{q}_2) = |\mathbf{q}_0|^2 + 2\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{q}_2 + q_2^2 \quad (\text{E.8})$$

más aun, es claro que el Jacobiano de la transformación $\mathbf{q}_1 \rightarrow \mathbf{q}_0 + \mathbf{q}_2$ es uno. Así haciendo el cambio de variable $\mathbf{q}_1 \rightarrow \mathbf{q}_0 + \mathbf{q}_2$ en la ecuación (E.6) obtenemos,

$$g(\mathbf{q}_2) = e^{-q_2^2} \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{q}_0| e^{-|\mathbf{q}_0|^2 - 2\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{q}_2} d\mathbf{q}_0 \quad (\text{E.9})$$

Ahora resolvamos esta ecuación.

Haciendo el cambio a coordenadas esféricas $\mathbf{q}_0 \rightarrow (\rho, \theta, \phi)$, tenemos por la ecuación (B.7),

$$\begin{aligned} g(\mathbf{q}_2) &= e^{-q_2^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \rho^3 \exp[-\rho^2 - 2q_2\rho \cos(\theta)] \sin(\theta) d\theta d\phi d\rho \\ &= 2\pi e^{-q_2^2} \int_0^\infty \rho^3 e^{-\rho^2} \left[\int_0^\pi e^{-2q_2\rho \cos(\theta)} \sin(\theta) d\theta \right] d\rho = \frac{\pi}{q_2} e^{-q_2^2} \int_0^\infty \rho^2 e^{-\rho^2} [e^{2q_2\rho} - e^{-2q_2\rho}] d\rho \\ &\frac{\pi}{q_2} e^{-q_2^2} \int_0^\infty e^{q_2^2} \left[\rho^2 e^{-(\rho-q_2)^2} - \rho^2 e^{-(\rho+q_2)^2} \right] = \frac{\pi}{q_2} \left[\int_0^\infty \rho^2 e^{-(\rho-q_2)^2} - \int_0^\infty \rho^2 e^{-(\rho+q_2)^2} \right] \quad (\text{E.10}) \end{aligned}$$

Ahora resolvamos la integral $\int_0^\infty \rho^2 e^{-(\rho-q_2)^2}$. Haciendo el cambio de variable $(\rho - \mathbf{q}_2) \rightarrow \lambda$, tenemos que,

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \rho^2 e^{-(\rho-q_2)^2} d\rho &= \int_{-q_2}^\infty (\lambda + q_2)^2 e^{-\lambda^2} d\lambda = \int_{-q_2}^\infty (\lambda^2 + 2q_2\lambda + q_2^2) e^{-\lambda^2} d\lambda \\ &= \int_{-q_2}^\infty \lambda^2 e^{-\lambda^2} d\lambda + 2q_2 \int_{-q_2}^\infty \lambda e^{-\lambda^2} d\lambda + q_2^2 \int_{-q_2}^\infty e^{-\lambda^2} d\lambda \quad (\text{E.11}) \end{aligned}$$

Resolvemos la primera de las integrales de (E.11) por partes, $\lambda e^{-\lambda^2} = \frac{d}{d\lambda} \left[-\frac{1}{2} e^{-\lambda^2} \right]$, de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \int_{-q_2}^\infty \lambda^2 e^{-\lambda^2} d\lambda &= \int_{-q_2}^\infty \lambda \frac{d}{d\lambda} \left[-\frac{1}{2} e^{-\lambda^2} \right] d\lambda = -\frac{\lambda}{2} e^{-\lambda^2} \Big|_{-q_2}^\infty + \frac{1}{2} \int_{-q_2}^\infty e^{-\lambda^2} \\ &= -\frac{q_2}{2} e^{-q_2^2} + \frac{1}{2} \int_0^{q_2} e^{-\lambda^2} d\lambda + \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-\lambda^2} d\lambda \end{aligned}$$

Luego por la ecuación (B.1) tenemos que,

$$\int_{-q_2}^\infty \lambda^2 e^{-\lambda^2} d\lambda = -\frac{q_2}{2} e^{-q_2^2} + \frac{1}{2} \int_0^{q_2} e^{-\lambda^2} d\lambda + \frac{\sqrt{\pi}}{4} \quad (\text{E.12})$$

Así también, la segunda integral de (E.11) se sigue directamente del hecho de que, $\lambda e^{-\lambda^2} = \frac{d}{d\lambda} \left[-\frac{1}{2} e^{-\lambda^2}\right]$:

$$2q_2 \int_{-q_2}^{\infty} \lambda e^{-\lambda^2} d\lambda = -q_2 e^{-\lambda^2} \Big|_{-q_2}^{\infty} = q_2 e^{-q_2^2} \quad (\text{E.13})$$

y para la tercera integral tenemos, por la ecuación (B.1):

$$q_2^2 \int_{-q_2}^{\infty} e^{-\lambda^2} d\lambda = q_2^2 \left[\int_0^{q_2} e^{-\lambda^2} d\lambda + \int_0^{\infty} e^{-\lambda^2} d\lambda \right] = q_2^2 \int_0^{q_2} e^{-\lambda^2} d\lambda + \frac{q_2^2}{2} \sqrt{\pi} \quad (\text{E.14})$$

Así, por (B.8), (E.12), (E.13) y (E.14) tenemos que:

$$\int_0^{\infty} \rho^2 e^{-(\rho-q_2)^2} d\rho = \frac{q_2^2}{2} e^{-q_2^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(q_2) \left[\frac{1}{2} + q_2^2 \right] + \frac{\sqrt{\pi}}{4} + q_2^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (\text{E.15})$$

De manera análoga obtenemos que,

$$\int_0^{\infty} \rho^2 e^{-(\rho+q_2)^2} d\rho = -\frac{q_2^2}{2} e^{-q_2^2} - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(q_2) \left[\frac{1}{2} + q_2^2 \right] + \frac{\sqrt{\pi}}{4} + q_2^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (\text{E.16})$$

Luego, sustituyendo (E.15) y (E.16) en (E.10), obtenemos finalmente que,

$$g(\mathbf{q}_2) = \frac{\pi^{3/2}}{2q_2} \operatorname{erf}(q_2) [1 + 2q_2^2] + \pi e^{-q_2^2} \quad (\text{E.17})$$

E.2. Cálculo de $J\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$

Sustituyendo (E.17) en la ecuación (E.7), tenemos que,

$$J(1/2, 1/2) = \frac{1}{4\pi^{9/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-|\mathbf{q}_2|^2} \left[\frac{\pi^{3/2}}{2|\mathbf{q}_2|} \operatorname{erf}(\mathbf{q}_2) [1 + 2|\mathbf{q}_2|^2] + \pi e^{-|\mathbf{q}_2|^2} \right]^2 d\mathbf{q}_2$$

Más aun, haciendo el cambio a coordenadas esféricas $\mathbf{q}_2 \rightarrow (\rho, \theta, \phi)$ e integrando la parte angular obtenemos,

$$\begin{aligned} J(1/2, 1/2) &= \frac{1}{4\pi^{9/2}} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} e^{-\rho^2} \left[\frac{\pi^{3/2}}{2\rho} \operatorname{erf}(\rho) [1 + 2\rho^2] + \pi e^{-\rho^2} \right]^2 \rho^2 \sin(\theta) d\theta d\phi d\rho \\ &= \frac{1}{\pi^{7/2}} \int_0^{\infty} \rho^2 e^{-\rho^2} \left[\frac{\pi^{3/2}}{2\rho} \operatorname{erf}(\rho) [1 + 2\rho^2] + \pi e^{-\rho^2} \right]^2 d\rho \end{aligned}$$

Luego, desarrollando el término cuadrático y separando términos,

$$J(1/2, 1/2) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\rho^2} \cdot \operatorname{erf}^2(\rho) (1 + 4\rho^2 + 4\rho^4) d\rho \quad (\text{E.18})$$

$$+ \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \rho e^{-2\rho^2} \cdot \operatorname{erf}(\rho) (1 + 2\rho^2) d\rho \quad (\text{E.19})$$

$$+ \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_0^{\infty} \rho^2 e^{-3\rho^2} d\rho \quad (\text{E.20})$$

Ahora desarrollemos las integrales (E.18), (E.19), (E.20).

Integral (E.18) Es claro que,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-\rho^2} \cdot \operatorname{erf}^2(\rho) (1 + 4\rho^2 + 4\rho^4) d\rho \\ &= \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-\rho^2} \cdot \operatorname{erf}^2(\rho) d\rho \end{aligned} \quad (\text{E.21a})$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \rho^2 e^{-\rho^2} \cdot \operatorname{erf}^2(\rho) d\rho \quad (\text{E.21b})$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \rho^4 e^{-\rho^2} \cdot \operatorname{erf}^2(\rho) d\rho \quad (\text{E.21c})$$

Para (E.21a) tenemos por las ecuaciones (B.1), (B.9) y (B.10),

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-\rho^2} \cdot \operatorname{erf}^2(\rho) d\rho &= \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-\rho^2} \left[1 - \frac{4}{\pi} \int_0^1 \frac{e^{-\rho^2(y^2+1)}}{y^2+1} dy \right] d\rho \\ &= \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-\rho^2} d\rho - \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_0^1 \int_0^\infty \frac{e^{-\rho^2(y^2+1)}}{y^2+1} d\rho dy \\ &= \frac{1}{8} - \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \frac{1}{y^2+1} \cdot \frac{1}{\sqrt{y^2+2}} dy = \frac{1}{8} - \frac{1}{2\pi} \left[\arctan \left(\frac{1}{2-\sqrt{3}} - \frac{\pi}{4} \right) \right] \\ &= \frac{1}{8} - \frac{1}{12} \end{aligned} \quad (\text{E.22})$$

Para (E.21b) tenemos por las ecuaciones (B.2), (B.9) y (B.11),

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \rho^2 e^{-\rho^2} \cdot \operatorname{erf}^2(\rho) d\rho &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \rho^2 e^{-\rho^2} \left[1 - \frac{4}{\pi} \int_0^1 \frac{e^{-\rho^2(y^2+1)}}{y^2+1} dy \right] d\rho \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \rho^2 e^{-\rho^2} d\rho - \frac{4}{\pi^{3/2}} \int_0^1 \int_0^\infty \frac{\rho^2 e^{-\rho^2(y^2+1)}}{y^2+1} d\rho dy \\ &= \frac{1}{4} - \frac{1}{\pi} \int_0^1 \frac{1}{y^2+1} \cdot \frac{1}{(y^2+2)^{3/2}} dy = \frac{1}{4} - \frac{1}{\pi} \left[\arctan \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right) - \frac{1}{2\sqrt{3}} \right] \\ &= \frac{1}{4} - \frac{1}{6} + \frac{\sqrt{3}}{6\pi} \end{aligned} \quad (\text{E.23})$$

Para (E.21c) tenemos por las ecuaciones (B.3), (B.9) y (B.12),

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \rho^4 e^{-\rho^2} \cdot \operatorname{erf}^2(\rho) d\rho &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \rho^4 e^{-\rho^2} \left[1 - \frac{4}{\pi} \int_0^1 \frac{e^{-\rho^2(y^2+1)}}{y^2+1} dy \right] d\rho \\ &= \frac{3}{8} - \frac{3}{2\pi} \int_0^1 \frac{1}{y^2+1} \cdot \frac{1}{(y^2+2)^{5/2}} dy = \frac{3}{8} - \frac{27}{108} + \frac{39\sqrt{3}}{108\pi} \end{aligned} \quad (\text{E.24})$$

Así, sumando (E.22), (E.23) y (E.24) obtenemos el valor de la integral (E.18),

$$\frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-\rho^2} \cdot \operatorname{erf}^2(\rho) (1 + 4\rho^2 + 4\rho^4) d\rho = \frac{1}{4} + \frac{19}{12\sqrt{3}\pi} \quad (\text{E.25})$$

Integral (E.19) Es claro que,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \rho e^{-2\rho^2} \cdot \operatorname{erf}(\rho) (1 + 2\rho^2) d\rho \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \rho e^{-2\rho^2} \cdot \operatorname{erf}(\rho) d\rho \end{aligned} \quad (\text{E.26a})$$

$$+ \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \rho^3 e^{-2\rho^2} \cdot \operatorname{erf}(\rho) d\rho \quad (\text{E.26b})$$

Integramos a (E.26a) por partes, así usando la ecuación (B.1) tenemos que,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \rho e^{-2\rho^2} \cdot \operatorname{erf}(\rho) d\rho &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{erf}(\rho) \cdot \frac{d}{d\rho} \left[-\frac{1}{4} e^{-2\rho^2} \right] d\rho \\ &= -\frac{\operatorname{erf}(\rho)}{4\pi} e^{-2\rho^2} \Big|_0^{\infty} + \frac{1}{2\pi^{3/2}} \int_0^{\infty} e^{-3\rho^2} d\rho = \frac{1}{4\sqrt{3}\pi} \end{aligned} \quad (\text{E.27})$$

Así también, integramos a (E.26b) por partes. Usando la ecuación (B.2) tenemos que,

$$\begin{aligned} \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \rho^3 e^{-2\rho^2} \cdot \operatorname{erf}(\rho) d\rho &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \rho^2 \operatorname{erf}(\rho) \frac{d}{d\rho} \left[-\frac{1}{4} e^{-2\rho^2} \right] d\rho \\ &= -\frac{\rho^2 \operatorname{erf}(\rho)}{2\pi} e^{-\rho^2} \Big|_0^{\infty} + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-2\rho^2} \left[2\rho \operatorname{erf}(\rho) + \frac{2\rho^2}{\sqrt{\pi}} e^{-\rho^2} \right] d\rho \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{erf}(\rho) \rho e^{-2\rho^2} d\rho + \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_0^{\infty} \rho^2 e^{-3\rho^2} d\rho \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{erf}(\rho) \cdot \frac{d}{d\rho} \left[-\frac{1}{4} e^{-2\rho^2} \right] d\rho + \frac{1}{12\sqrt{3}\pi} \\ &= -\frac{\operatorname{erf}(\rho)}{4\pi} e^{-2\rho^2} \Big|_0^{\infty} + \frac{1}{2\pi^{3/2}} \int_0^{\infty} e^{-3\rho^2} d\rho + \frac{1}{12\sqrt{3}\pi} \\ &= \frac{1}{4\sqrt{3}\pi} + \frac{1}{12\sqrt{3}\pi} = \frac{1}{3\sqrt{3}\pi} \end{aligned} \quad (\text{E.28})$$

Luego, sumando (E.27) y (E.28) obtenemos el valor de la integral (E.19),

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \rho e^{-2\rho^2} \cdot \operatorname{erf}(\rho) (1 + 2\rho^2) d\rho = \frac{7}{12\sqrt{3}\pi} \quad (\text{E.29})$$

Integral (E.20) Esta integral se sigue directamente de la ecuación (B.2),

$$\frac{1}{\pi^{3/2}} \int_0^{\infty} \rho^2 e^{-3\rho^2} d\rho = \frac{1}{12\sqrt{3}\pi} \quad (\text{E.30})$$

De esta forma, sumando (E.25), (E.29) y (E.30) obtenemos el valor de $J(1/2, 1/2)$:

$$\begin{aligned} J(1/2, 1/2) &= \frac{1}{4} + \frac{19}{12\sqrt{3}\pi} + \frac{7}{12\sqrt{3}\pi} + \frac{1}{12\sqrt{3}\pi} \\ &= \frac{1}{4} + \frac{3\sqrt{3}}{4\pi} = 0,663497 \end{aligned} \quad (\text{E.31})$$

Apéndice F

Cálculo $J(1,0)$

Por la ecuación (E.1), tenemos que $J(1,0)$ está dada por,

$$J(1,0) = \frac{1}{\pi^{9/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{q}_2| \exp \left[-\frac{|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^2}{2} - |\mathbf{q}_2|^2 - \frac{|\mathbf{q}_1|^2}{2} \right] \frac{\sinh [|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mathbf{q}_2|]}{|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mathbf{q}_2|} d\mathbf{q}_1 \right]^2 d\mathbf{q}_2 \quad (\text{F.1})$$

Denotando por $h(\mathbf{q}_2)$ a,

$$h(\mathbf{q}_2) := \int_{\mathbb{R}^3} \exp \left[-\frac{|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^2}{2} - \frac{|\mathbf{q}_1|^2}{2} \right] \frac{e^{|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mathbf{q}_2|} - e^{-|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mathbf{q}_2|}}{|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2| \cdot |\mathbf{q}_2|} d\mathbf{q}_1 \quad (\text{F.2})$$

podemos reescribir a (F.1) como:

$$J(1,0) = \frac{1}{4\pi^{9/2}} \int_{\mathbb{R}^3} h^2(\mathbf{q}_2) e^{-2|\mathbf{q}_2|^2} |\mathbf{q}_2|^2 d\mathbf{q}_2 \quad (\text{F.3})$$

Ahora calculemos $h(\mathbf{q}_2)$

F.1. Cálculo de $h(\mathbf{q}_2)$

Denotando,

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_0 &:= \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 \\ |\mathbf{q}_0| &= q_0 \\ |\mathbf{q}_2| &= q_2 \end{aligned}$$

es claro que, $|\mathbf{q}_1|^2 = q_0^2 - 2\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{q}_2 + q_2^2$.

Haciendo en cambio de variable $\mathbf{q}_1 \rightarrow \mathbf{q}_0 - \mathbf{q}_2$, en (F.2) obtenemos,

$$h(\mathbf{q}_2) = e^{-q_2^2/2} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-q_0^2} \left[\frac{e^{q_0 q_2} - e^{-q_0 q_2}}{q_0 q_2} \right] e^{\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{q}_2} d\mathbf{q}_0 \quad (\text{F.4})$$

Tomando un sistema de referencia en el que \mathbf{q}_2 sea paralelo al eje z y haciendo el cambio a coordenadas esféricas $\mathbf{q}_0 \rightarrow (\rho, \theta, \phi)$, tenemos que (F.4) se puede reescribir como,

$$h(\mathbf{q}_2) = e^{-q_2^2/2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{-\rho^2} \left[\frac{e^{\rho q_2} - e^{-\rho q_2}}{\rho q_2} \right] e^{\rho q_2 \cos(\theta)} \rho^2 \sin(\theta) d\theta d\phi d\rho \quad (\text{F.5})$$

Integrando respecto a ϕ y por las ecuaciones (B.1), (B.4) y (B.7), tenemos que,

$$\begin{aligned}
 h(\mathbf{q}_2) &= 2\pi e^{-q_2^2/2} \int_0^\infty e^{-\rho^2} \left[\frac{e^{\rho q_2} - e^{-\rho q_2}}{q_2} \right]^2 d\rho = \frac{2\pi}{q_2^2} e^{-q_2^2/2} \int_0^\infty e^{-\rho^2} [e^{2\rho q_2} + e^{-2\rho q_2} - 2] d\rho \\
 &= \frac{2\pi}{q_2^2} e^{-q_2^2/2} \left[\int_0^\infty e^{-\rho^2} e^{2\rho q_2} d\rho + \int_0^\infty e^{-\rho^2} e^{-2\rho q_2} d\rho - \int_{-\infty}^\infty e^{-\rho^2} d\rho \right] \\
 &= \frac{2\pi}{q_2^2} e^{-q_2^2/2} \left[\int_{-\infty}^\infty e^{-\rho^2} e^{2\rho q_2} d\rho - \int_{-\infty}^\infty e^{-\rho^2} d\rho \right] = \frac{2\pi^{3/2}}{q_2^2} [e^{q_2^2/2} - e^{-q_2^2/2}]
 \end{aligned} \tag{F.6}$$

Por (F.6) tenemos,

$$h^2(\mathbf{q}_2) = \frac{4\pi^3}{q_2^4} [e^{q_2^2} + e^{-q_2^2} - 2] \tag{F.7}$$

F.2. Cálculo de $J(1,0)$

Sustituyendo (F.7) en (F.3) obtenemos,

$$J(1,0) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{-2q_2^2}}{q_2^2} [e^{q_2^2} + e^{-q_2^2} - 2] d\mathbf{q}_2$$

Haciendo el cambio a coordenadas esféricas $\mathbf{q}_2 \rightarrow (\rho, \theta, \phi)$ e integrando la parte angular, tenemos que,

$$J(1,0) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-\rho^2} + e^{-3\rho^2} - 2e^{-2\rho^2} d\rho$$

Por la ecuación (B.1) tenemos que,

$$\begin{aligned}
 J(1,0) &= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{3}} - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \right] \\
 &= 2 \left[1 + \frac{1}{\sqrt{3}} - \sqrt{2} \right] = 0,32627
 \end{aligned} \tag{F.8}$$

Parte IV

Referencias

- [1]: R.Weder, *Entanglement creation in low-energy scattering*, arXiv:1109.4005, Physical Review A Vol.84 2011.
- [2]: Einstein A, Podolsky B, Rosen N (1935). *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?*. Phys. Rev. 47.
- [3]: Schrodinger E; Born, M. (1935). *Discussion of probability relations between separated systems*. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society 31.
- [4]: J. S. Bell (1964). *On the Einstein- Podolsky-Rosen paradox*. Physics.
- [5]: Freedman, Stuart J.; Clauser, John F. (1972). *Experimental Test of Local Hidden-Variable Theories*. Physical Review Letters 28 (14).
- [6]: A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger (1982). *Experimental Realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment: A New Violation of Bell's Inequalities*. Physical Review Letters 49 (2).
- [7]: W.Rudin, *Principles of Mathematical Analysis*, 2nd ed. McGraw-Hill Kogakusha, Japan, 1964.
- [8]: M.Reed, B.Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics I. Functional analysis*, Academic Press, San Diego, 1980.
- [9]: G.Teschl, *Mathematical Methods in Quantum Mechanics*, American Mathematical Society, Rhode island, 2009.
- [10]: M.S.Birman, M.Z.Solomjak, *Spectral Theory of Self-Adjoint Operators in Hilbert Space*, D.Reidel Publishing Company, 1987, Holland.
- [11]: H.Brezis, *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*, Springer, New York, 2011.
- [12]: B.Thaller, *Visual Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, New York, 2000.
- [13]: B.Thaller, *Advanced Visual Quantum Mechanics*, Springer, New York, 2005.
- [14]: Cohen-Tannoudji, B.Diu, F.Laloe, *Quantum Mechanics Vol. 1*, Wiley, New York, 1978.
- [15]: S.T.Thornton, J.B.Marion, *Classical Dynamics of Particles and Systems 5th ed*; Thomson Brooks/Cole, Belmont CA. 2004.
- [16]: J.Stoer, R.Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis 2nd ed*; Springer Verlag, New York, 1993.
- [17]: W.O.Amrein, J.M. Jauch, K.B.Sinha, *Scattering Theory in Quantum Mechanics*, W.A. Benajmin Inc. New York, 1977.

[18]: A.Jensen and T.Kato, *Duke Math. J.* 46, 583 (1979).

[19]: H.L.Royden, *Real Analysis*, Macmillan, New York, 1968.

[20]: R.A.Adams, J.J.Fournier, *Sovolev Spaces 2nd ed*;
Elsevier-Academic Prees, Amsterdam, 2003.

[21]: M.Schechter, *Spectra of Partial Differential Operators 2nd ed*;
North Holland, Amsterdam, 1986.