

El proceso de Ornstein-Uhlenbeck, el oscilador armónico cuántico y la fórmula de Feynman-Kac^{*}

Oswaldo González Gaxiola y Roberto Quezada Batalla

Departamento de Matemáticas, UAM-Iztapalapa

Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina

09340 Iztapalapa, México D.F.

gaxiola@oso.izt.uam.mx

roqb@xanum.uam.mx

Resumen

Presentamos de una manera intuitiva el modelo matemático del oscilador armónico cuántico y discutimos brevemente la fórmula de Feynman-Kac en términos de álgebras de operadores.

1. Introducción

Debido a la poca comunicación entre matemáticos y físicos que ocurre desde los estudios de licenciatura, algunas de las más interesantes y profundas relaciones entre matemáticas y física son accesibles sólo para los investigadores que estudian matemáticas y física a nivel avanzado. Este es el caso de la fórmula de Feynman-Kac para perturbaciones del oscilador armónico cuántico, un resultado fundamental de la Física-Matemática que combina conceptos de física y matemáticas, aparentemente sin relación alguna.

Cuando Mark Kac [2] trataba de entender un trabajo de Richard Feynman [1], encontró una demostración de lo que desde entonces se conoce como fórmula de Feynman-Kac. Esta fórmula es una representación integral de la acción del semigrupo de contracciones asociado

^{*}Apoyado por CONACYT, Proyecto 37491-E.

con el Hamiltoniano de una partícula cuántica que evoluciona bajo la influencia de la fuerza producida por un potencial. Se trata de una integral sobre un espacio de dimensión infinita respecto de la medida de Wiener. Actualmente el nombre de Feynman-Kac también se aplica a otras representaciones integrales que dan la solución de una ecuación diferencial en forma cerrada y que permiten obtener estimaciones a priori de las soluciones, sus propiedades asintóticas y estimaciones para los valores propios de los operadores involucrados.

En este trabajo presentamos al lector una breve discusión de la fórmula de Feynman-Kac para el oscilador armónico cuántico en el contexto de álgebras de operadores. Nuestro propósito es ilustrar con este bello ejemplo, cómo la física teórica y la matemática se enriquecen mutuamente. La formulación en términos de álgebras de operadores permitirá, por una parte, que el lector se informe sobre el potencial de aplicaciones de la teoría de álgebras de operadores. Por otra parte, nos permitirá describir al lector la manera en que muchos conceptos matemáticos se pueden extender a un contexto no conmutativo a través de extensiones no conmutativas de álgebras conmutativas clásicas. Este tipo de extensiones son un ingrediente fundamental de teorías matemáticas muy recientes que se desarrollan en estrecha relación con la Física Cuántica, como la Geometría y la Probabilidad Cuánticas.

2. Brevísima introducción a la Mecánica Cuántica

La Mecánica Cuántica es un modelo matemático del mundo físico. Para describirlo introduciremos los conceptos de estado, observable, valor esperado y ley dinámica.

Estados. Un estado es una descripción completa de un sistema físico. En mecánica cuántica un estado (estado puro) es un rayo en un espacio de Hilbert complejo. Recuérdese que un espacio de Hilbert complejo es un espacio vectorial sobre los complejos, que tiene un producto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$ que es definido positivo y sesquilineal, es decir, es lineal en una coordenada y lineal conjugado en la otra, y el espacio es completo en la norma $\| \cdot \|$ inducida por el producto interno.

Un rayo en un espacio de Hilbert complejo \mathcal{H} es una clase de equivalencia de vectores $u \in \mathcal{H}$ bajo la relación de equivalencia: $u \sim v$ si y sólo si $u = zv$, para algún $z \in \mathbb{C}$. Podemos tomar como representante

de cada clase a un vector unitario u , ($\|u\| = 1$). Pero nótese que el vector $e^{i\theta}u$, $\theta \in \mathbb{R}$, también representa al mismo rayo.

Observables. Una observable es una propiedad del sistema físico que se puede medir, como la energía, la posición o el momento. En mecánica cuántica las observables se representan por operadores autoadjuntos. Es decir, una observable A es una transformación lineal de \mathcal{H} en sí mismo que satisface la condición $A = A^\dagger$ donde A^\dagger es el adjunto de A definido mediante la condición

$$\langle u, Av \rangle = \langle A^\dagger u, v \rangle,$$

que debe cumplirse para todo $u, v \in \mathcal{H}$.

Valores esperados (Regla de Born, 1926). El valor esperado de una observable A en un estado u está dado por el número real $\langle u, Au \rangle$. Por ejemplo, el valor esperado de A en uno de sus vectores propios u es

$$\langle u, Au \rangle = \langle u, au \rangle = a,$$

donde a es el valor propio de A asociado con u .

Dinámica. En la representación de Schrödinger la evolución de un sistema cuántico se especifica indicando cómo cambian los estados del sistema con el transcurso del tiempo. Este movimiento de los estados se realiza mediante una familia de transformaciones unitarias U_t de \mathcal{H} en sí mismo que, de acuerdo con el Teorema de Stone ver [6], está generada por un operador autoadjunto H , llamado *Hamiltoniano* del sistema. De manera que si u es el estado inicial del sistema entonces $u_t = U_t u$ satisface la ecuación de Schrödinger

$$\frac{d}{dt}u_t = -iHu_t.$$

Ejemplo: Supóngase que podemos aislar una partícula y observar su movimiento sobre una línea recta. Es decir, tenemos un aparato que nos permite detectar las señales que ella emite. Supongamos también que el movimiento de esta partícula se realiza dentro de un campo que genera una energía potencial V .

Un modelo de mecánica cuántica para este sistema es el que consiste del espacio de Hilbert $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R})$, el espacio de las funciones medibles en la recta cuyo módulo al cuadrado es una función integrable. Los estados del sistema son rayos en este espacio y las observables operadores autoadjuntos no necesariamente acotados. La observable que corresponde con la energía total de la partícula es el Hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V,$$

donde V denota al operador de multiplicación inducido por la función V : $(Vu)(x) = V(x)u(x)$, \hbar es la constante de Planck reducida y m es la masa de la partícula.

El movimiento de esta partícula está descrito por la correspondiente ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} u_t = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u_t + V u_t,$$

con la condición inicial $u_0 = u$. Si la partícula se encuentra en un estado u_t , el valor esperado de la observable $1_{[a,b]}$, con $a < b$, es decir del operador de multiplicación inducido por la función indicadora del intervalo $[a, b]$, es

$$\langle u_t, 1_{[a,b]} u_t \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{u}_t(x) 1_{[a,b]}(x) u_t(x) dx = \int_a^b |u_t(x)|^2 dx.$$

Este valor esperado se interpreta como *la probabilidad de que al medir la posición de la partícula se obtenga un valor en el intervalo $[a, b]$, cuando el experimento se ha preparado en el estado u .*

3. El oscilador armónico cuántico

Consideremos ahora el caso de una partícula moviéndose en una recta bajo la influencia de la energía potencial correspondiente a un oscilador armónico clásico, es decir, $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, donde $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ es la frecuencia de oscilación.

La imagen física que conviene tener en mente no es la de un sistema masa-resorte, sino la idea de una caja negra que emite y absorbe energía en múltiplos de una cantidad fija “quantum”, propuesta por Planck en 1900. Si queremos conocer la dinámica del sistema, debemos resolver la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_t(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi_t(x),$$

con la condición inicial $\psi_{t=0}(x) = \psi(x)$.

Resolvamos esta ecuación por el método de separación de variables, es decir, buscaremos soluciones de la forma $\psi_t(x) = f(t)\phi(x)$. Derivando y sustituyendo en la ecuación se obtiene la identidad

$$\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{d}{dt} f(t) = \frac{1}{\phi(x)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \phi(x) \right),$$

que se cumple si existen valores “constantes” E tales que

$$i\hbar \frac{df}{dt} = Ef,$$

de donde resulta $f(t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$; y

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \phi(x) = E \phi(x),$$

o equivalentemente $H\phi = E\phi$, que es un problema de valores propios para el *Hamiltoniano* H .

Por simplicidad de ahora en adelante supondremos que \hbar , m y ω son todas iguales a 1. Con esta convención tenemos que $H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2$. Definamos los operadores $P = -i \frac{d}{dx}$ y Q el operador de multiplicación inducido por la función identidad $I(x) = x$, entonces $P^2\phi = -i \frac{d}{dx} (-i \frac{d}{dx} \phi) = -\frac{d^2}{dx^2} \phi$, $(Q^2\phi)(x) = x^2\phi(x)$, y por lo tanto $H = \frac{1}{2}(P^2 + Q^2)$. Dirac propuso la siguiente factorización $H = \frac{1}{\sqrt{2}}(P - iQ) \frac{1}{\sqrt{2}}(P + iQ)$, pero P y Q son operadores que no conmutan, de hecho, si denotamos por $[P, Q]$ al conmutador de P y Q , tenemos que

$$([P, Q]\phi)(x) = -i \frac{d}{dx}(x\phi(x)) - x(-i \frac{d}{dx}\phi(x)) = -i\phi(x),$$

es decir, $[P, Q] = -iI$. No obstante sigamos la idea de Dirac, si tal factorización fuera posible, desarrollando el producto tendríamos

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(P - iQ) \frac{1}{\sqrt{2}}(P + iQ) = H + \frac{i}{2}[P, Q] = H + \frac{1}{2}I,$$

que es una factorización de $H + \frac{1}{2}I$, pero esto es suficiente para nuestro propósito.

Pongamos nombre a los factores de Dirac. Sean $a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(P - iQ)$ y $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(P + iQ)$, entonces $H = a^\dagger a + \frac{1}{2}$ y además $[a, a^\dagger] = I$, $[H, a] = -a$ y $[H, a^\dagger] = a^\dagger$. Si existiera una función ϕ_0 tal que $a\phi_0 = 0$, entonces $H\phi_0 = (a^\dagger a + \frac{1}{2}I)\phi_0 = \frac{1}{2}\phi_0$. Es decir, ϕ_0 sería un vector propio de H con valor propio asociado igual a $\frac{1}{2}$. Un cálculo simple muestra que la ecuación $a\phi_0 = 0$ es equivalente con $\frac{d}{dx}\phi_0(x) = x\phi_0(x)$, que es una ecuación lineal de primer orden con solución general de la forma $\phi_0(x) = ce^{-\frac{x^2}{2}}$. Si además pedimos que ϕ_0 sea un estado, es decir, $\|\phi_0\| = 1$, entonces $c = \pi^{-\frac{1}{4}}$ y ϕ_0 resulta ser la Gaussiana $\phi_0(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2}}$ que en mecánica cuántica se llama estado fundamental o estado base del

oscilador armónico cuántico. La razón de este nombre es la siguiente, como $[H, a^\dagger] = a^\dagger$, usando repetidamente esta relación resulta que

$$\begin{aligned} H a^{\dagger n} \phi_0 &= a^{\dagger n} H \phi_0 + [H, a^{\dagger n}] \phi_0 \\ &= \frac{1}{2} a^{\dagger n} \phi_0 + [H, a^\dagger] a^{\dagger(n-1)} \phi_0 + a^\dagger [H, a^{\dagger(n-1)}] \phi_0 \\ &= \dots = \left(n + \frac{1}{2}\right) a^{\dagger n} \phi_0. \end{aligned}$$

Es decir, las funciones $(a^{\dagger n} \phi_0)_{n \geq 0}$ son vectores propios de H con valores propios $(n + \frac{1}{2})_{n \geq 0}$. Tomando en cuenta que los vectores propios de un operador autoadjunto son ortogonales y que $\|a^{\dagger n} \phi_0\|^2 = n!$, con un poco más de trabajo podemos concluir que se cumple lo siguiente.

Teorema 3.1. *El espectro de H es el subconjunto $\{n + \frac{1}{2} : n \geq 0\}$ y las funciones $\{\phi_n = (n!)^{-\frac{1}{2}} a^{\dagger n} \phi_0 : n \geq 0\}$ forman una base ortonormal de $L_2(\mathbb{R})$.*

En la figura 1 se bosquejan las gráficas de los primeros elementos de esta base ortonormal.

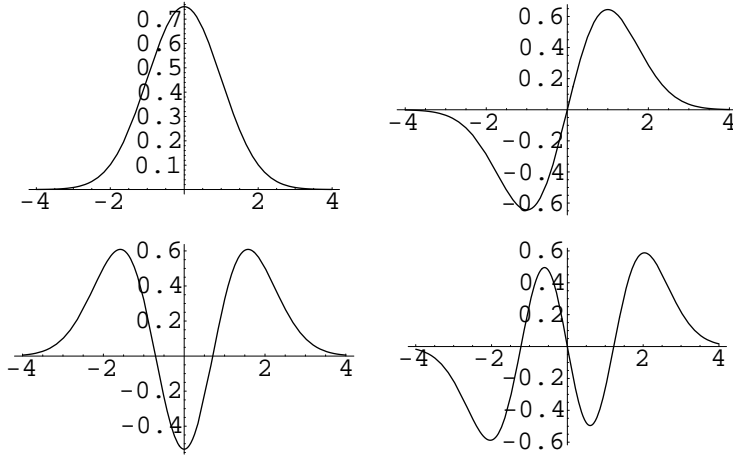


Figura 1: Estado fundamental y primeros vectores propios de H .

De acuerdo con el método de separación de variables, a partir de todo esto podemos concluir que la solución de la ecuación de Schrödinger se puede representar en la forma $\psi_t(x) = \sum_{n \geq 0} c_n e^{-(n+\frac{1}{2})t} \phi_n(x)$, con $\sum_{n \geq 0} c_n^2 < \infty$.

Continuemos con nuestro análisis del oscilador armónico cuántico. Con un cálculo simple se ve que $a^\dagger \phi_n = (n + \frac{1}{2}) \phi_{n+1}$, $a \phi_n = n^{\frac{1}{2}} \phi_{n-1}$

y $a^\dagger a \phi_n = n \phi_n$. Nótese que $a^\dagger a$ es un operador autoadjunto y su valor esperado en el estado ϕ_n es

$$\langle \phi_n, a^\dagger a \phi_n \rangle = \langle \phi_n, n \phi_n \rangle = n.$$

Por esta razón ϕ_n se llama el estado de n partículas. Las relaciones anteriores aceptan la siguiente interpretación: si el oscilador armónico cuántico se encuentra en el estado ϕ_n , entonces

- (i) (*El operador de número*) El operador $a^\dagger a$ indica el número de partículas en ese estado.
- (ii) (*El operador de creación*) El operador a^\dagger añade (o crea) una partícula al estado ϕ_n , incrementando la energía del sistema en $\hbar\omega$ unidades.
- (iii) (*El operador de aniquilación*) El operador a aniquila una partícula del estado ϕ_n disminuyendo la energía del sistema en $\hbar\omega$ unidades.

Otra consecuencia importante de la relación $[P, Q] = -iI$ que se llama *relación canónica de conmutación*, es el principio de incertidumbre de Heisenberg.

Proposición 3.2. (Principio de incertidumbre de Heisenberg)

Sean A y B dos operadores autoadjuntos en un espacio de Hilbert \mathcal{H} tales que $[A, B] = iC$, donde C es un operador autoadjunto que conmuta con A y B . Sea $u \in \mathcal{H}$ un vector unitario y defínase para $k \geq 1$, $\langle A^k \rangle = \langle u, A^k u \rangle$ y $Var(A) = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$. Entonces

$$\sqrt{Var(A)} \sqrt{Var(B)} \geq \langle C \rangle.$$

Nótese que con $a = \langle A \rangle$ y $b = \langle B \rangle$ se tiene

$$\langle (A - aI)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - 2a\langle A \rangle + a^2 = \langle A^2 \rangle - a^2 = Var(A)$$

y

$$[A - aI, B - bI] = iC.$$

Entonces reemplazando A y B por $A - aI$ y $B - bI$ respectivamente, si es necesario, podemos suponer que $a = b = 0$. Ahora

$$AB = \frac{1}{2}(AB + BA) + \frac{1}{2}[A, B] = \frac{1}{2}(AB + BA) + iC,$$

por lo tanto

$$\begin{aligned}\langle Au, Bu \rangle &= \langle u, ABu \rangle = \Re \langle Au, Bu \rangle + i\Im \langle Au, Bu \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle u, (AB + BA)u \rangle + \frac{i}{2} \langle C \rangle.\end{aligned}$$

Consecuentemente

$$\begin{aligned}\frac{1}{4} (|\langle u, (AB + BA)u \rangle|^2 + \langle C \rangle^2) &= |\langle Au, Bu \rangle|^2 \leq \|Au\|^2 \|Bu\|^2 \\ &= \langle u, A^2u \rangle \langle u, B^2u \rangle = \text{Var}(A)\text{Var}(B).\end{aligned}$$

Esto demuestra que

$$\text{Var}(A)\text{Var}(B) \geq \langle C \rangle^2.$$

Este resultado acepta la siguiente interpretación: *en ningún estado las observables A y B se pueden medir simultáneamente sin error. O bien, entre más precisa es la medición de A , más imprecisa será la medición de B .*

4. El proceso del oscilador armónico cuántico

Para mayor simplicidad conviene trasladar el espectro de H , de manera que el conjunto de sus valores propios sea \mathbb{N} . Llamaremos H_0 al Hamiltoniano trasladado, es decir,

$$H_0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 - \frac{1}{2}.$$

Se puede establecer (ver [5]) que H_0 genera un semigrupo de contracciones

$$P_t = e^{-tH_0} \quad t \geq 0,$$

resulta que P_t es un operador autoadjunto y positivo definido para cada $t \geq 0$, es decir, $\langle u, P_t u \rangle \geq 0$, $\forall u \in L_2(\mathbb{R})$ y $P_t^\dagger = P_t$.

Denotaremos por M_f el operador de multiplicación inducido por f sobre $L_2(\mathbb{R})$ para $f \in C_0(\mathbb{R})$, es decir,

$$M_f g(x) = f(x)g(x), \quad g \in C_0(\mathbb{R}).$$

El proceso del oscilador armónico es una familia $(B_t)_{t \in \mathbb{R}}$ de variables aleatorias Gaussianas con media cero y covarianza

$$E(B_t B_s) = \frac{1}{2} e^{|t-s|}.$$

Este proceso se llama en Probabilidad el proceso de velocidades de Ornstein-Uhlenbeck, pues Uhlenbeck y Ornstein definieron un proceso x_t con trayectorias diferenciables tal que $\frac{dx_t}{dt} = B_t$.

Es posible demostrar que $B_t = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-t}b_{e^{2t}}$, donde b_t es el movimiento browniano. El proceso B_t tiene trayectorias continuas y si (Ω, \mathcal{F}, P) es el espacio de Probabilidad donde está definido podemos pensar a Ω como el espacio de trayectorias continuas del proceso,

$$\Omega = \{\omega : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} : \omega \text{ continua, } \omega(t) = B_t(\omega)\}.$$

Tenemos el siguiente teorema cuya demostración se puede hallar en [5].

Teorema 4.1. Sean $f_0, \dots, f_n \in L_2(\mathbb{R})$, $-\infty < s_0 < s_1 < \dots < s_n < \infty$. Entonces

$$E(f_0(\phi(s_0)) \cdots f_n(\phi(s_n))) = \langle \phi_0, M_{f_0} e^{-t_1 H_0} M_{f_1} \cdots e^{-t_n H_0} M_{f_n} \phi_0 \rangle, \quad (1)$$

donde $t_i = s_i - s_{i-1}$, $i = 1, 2, \dots, n$. Además P es la única medida de probabilidad que satisface la relación (1).

Un espacio algebraico de probabilidad (ver [3]) es un par (\mathcal{A}, ρ) donde \mathcal{A} es una *-álgebra y ρ es un estado sobre \mathcal{A} . Una *-álgebra es un álgebra compleja de Banach con una aplicación (involución) $a \rightarrow a^*$ aditiva, lineal conjugada, involutiva ($(a^*)^* = a$) y $(ab)^* = b^*a^*$, tal que $\|a^*a\| = \|a\|^2$ para cada $a \in \mathcal{A}$. Un estado ρ es un *-funcional ($\rho(a^*) = \rho(a)^*$) que envía elementos positivos de \mathcal{A} , es decir, elementos de la forma a^*a en reales positivos y preserva la unidad, es decir, $\rho(e) = e$, donde e es la unidad en \mathcal{A} .

Si \mathcal{A} no es conmutativa el par (\mathcal{A}, ρ) es un espacio de Probabilidad Cuántica. Todo espacio de Probabilidad Clásica es un espacio algebraico de probabilidad pues basta reemplazar la terna (Ω, \mathcal{F}, P) por el par

$$(L_\infty(\Omega, \mathcal{F}, P), \rho)$$

donde $L_\infty(\Omega, \mathcal{F}, P)$ es la *-álgebra de todas las funcionales complejas, \mathcal{F} -medibles y acotadas en Ω con la involución dada por la conjugación y ρ es el estado sobre $L_\infty(\Omega, \mathcal{F}, P)$ definido mediante

$$\rho(f) = \int_{\Omega} f dP = Ef.$$

La fórmula (1) nos da una relación entre la Probabilidad Clásica y la Probabilidad Cuántica; es decir, hay dos conceptos de valor esperado involucrados en esta fórmula. El lado izquierdo es el valor esperado de una

variable aleatoria definida sobre el espacio de Probabilidad (Ω, \mathcal{F}, P) y el lado derecho es el valor esperado de una variable aleatoria en un espacio de Probabilidad Cuántica. En el lado derecho de (2) se tiene el valor esperado del operador autoadjunto $M_{f_0} e^{-t_1 H_0} M_{f_1} \cdots e^{-t_n H_0} M_{f_n}$ de la $*$ -álgebra $\mathcal{B}(L_2(\mathbb{R}))$ respecto del estado η definido por

$$\eta(A) = \langle \phi_0, A\phi_0 \rangle,$$

el cual es el valor esperado de A en el estado fundamental, “*vacuum expectation*”. En este último caso $(\mathcal{B}(L_2(\mathbb{R})), \eta)$ es un espacio algebraico de probabilidad, de hecho, un espacio de Probabilidad Cuántica.

Definición 4.2. *Definimos la traslación como la acción de \mathbb{R} sobre Ω dada para cada $a \in \mathbb{R}$ por*

$$\tau_a \omega(x) = \omega(x + a).$$

Y la reflexión de Ω en Ω dada para cada $\omega \in \Omega$ por

$$r\omega(t) = \omega(-t).$$

La cual invierte el sentido del tiempo.

Nótese que r es un homeomorfismo de Ω que satisface

$$r^2 = id, \quad r\tau_a = \tau_{-a}r, \quad \forall a \in \mathbb{R}.$$

Una propiedad importante del proceso B_t es la siguiente.

Proposición 4.3. *P es invariante bajo traslaciones $\tau_s \omega(t) = \omega(t + s)$, y bajo la reflexión $r\omega(t) = \omega(-t)$.*

5. Perturbaciones del oscilador armónico (Fórmula de Feynman-Kac)

Un problema fundamental en Física Cuántica es describir la dinámica de un oscilador armónico cuántico cuando éste se encuentra bajo la influencia de otro sistema que produce una energía potencial V . En este caso el Hamiltoniano tiene la forma $\hat{H} = H_0 + M_V$, donde V es una función continua, $V : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$, la energía potencial del campo producido por el otro sistema.

La dinámica quedará totalmente caracterizada por el operador \hat{H} si se demuestra que éste es autoadjunto, pues en este caso se sabe

que la correspondiente ecuación de Schrödinger tiene una única solución global, i.e., válida para todo tiempo $t \in \mathbb{R}$. Demostrar que \hat{H} es un operador autoadjunto es un problema fundamental de la Física Matemática.

Ahora bien, existen tres formas equivalentes de describir a un operador autoadjunto (sus tres caras):

1. Un operador autoadjunto definido sobre un subespacio denso de \mathcal{H} .
2. Una medida espectral definida sobre \mathbb{R} .
3. Un grupo unitario (representación unitaria del grupo aditivo de \mathbb{R}) fuertemente continuo.

La equivalencia entre 1 y 2 es la versión de John von Neumann del teorema espectral y la equivalencia entre 1 y 3 es el Teorema de Stone, ver [6].

En particular H_0 , tiene una cara más, que se puede obtener a partir de la medida espectral correspondiente E como su transformada de Laplace:

$$P_t = \int_0^\infty e^{-\lambda t} E(d\lambda).$$

Éste es un semigrupo (representación del semigrupo aditivo de los reales nonegativos) de contracciones, $\|P_t\| \leq 1$, fuertemente continuo. El correspondiente grupo unitario se define mediante la transformada de Fourier de E :

$$U_t = \int_0^\infty e^{-i\lambda t} E_\lambda(d\lambda).$$

La equivalencia de 3 con la existencia del semigrupo P_t está demostrada en [4], una versión más detallada se encuentra en [5]. Resulta que el generador infinitesimal de P_t es el operador $-H_0$, i.e., $P_t = e^{-tH_0}$.

Análogamente, el problema de la adjunticidad de \hat{H} se puede tratar de manera “indirecta” contruyendo un semigrupo de contracciones $(Q_t)_{t \geq 0}$ en $L_2(\mathbb{R})$ cuyo generador infinitesimal sea $-\hat{H}$ ó alguna extensión autoadjunta de este operador. Esto es lo que Feynman describió en [1] y Mark Kac demostró en [2], de hecho se tiene

$$\langle f\phi_0, Q_t g\phi_0 \rangle = \int_\Omega \bar{f}(B_0)g(B_t)e^{-\int_0^t V(B_s)ds} dP,$$

para todo par de funciones $f, g \in L_2(\mathbb{R}, \phi_0^2(x)dx)$. Esta es la fórmula de Feynman-Kac para perturbaciones del oscilador armónico cuántico, el lector interesado puede consultar una demostración en [7].

En esta sección describiremos otra construcción de Q_t en términos de álgebras de operadores, esto nos permitirá mostrar al lector cómo los métodos de álgebras de operadores se aplican en la solución de problemas interesantes de la Física Cuántica, esperamos que esto despierte su curiosidad.

Definamos dos operadores unitarios U_t y R sobre $L_2(\Omega)$ mediante

$$(U_t F)(\omega) = F(\tau_t \omega), \quad t \in \mathbb{R}$$

$$\text{y} \quad (R F)(\omega) = F(r\omega), \quad F \in L_2(\Omega).$$

$(U_t)_{t \in \mathbb{R}}$ es un grupo fuertemente continuo de operadores unitarios en $L_2(\Omega)$, y se tiene la relación

$$R U_t = U_{-t} R.$$

Para cada $f \in C_0(\mathbb{R})$ considérese el operador $\sigma(f)$ sobre $L_2(\Omega)$ dado por

$$\sigma(f)F(\omega) = f(\omega(0))F(\omega), \quad f \in C_0(\mathbb{R}), \quad F \in L_2(\Omega).$$

La aplicación $f \rightarrow \sigma(f)$, define una *-representación de $C_0(\mathbb{R})$ sobre $L_2(\Omega)$.

Sea \mathcal{A} el álgebra débilmente cerrada de operadores sobre $L_2(\Omega)$ generada por

$$\{\sigma(f) : f \in C_0(\mathbb{R})\} \cup \{U_t : t \geq 0\}.$$

\mathcal{A} es un álgebra de operadores no conmutativa y no autoadjunta sobre $L_2(\Omega)$, ver [4].

Un subespacio cerrado \mathcal{M} de $L_2(\Omega)$ se dice que es *semi-invariante* bajo el álgebra \mathcal{A} , ver [5], si la proyección Q sobre \mathcal{M} satisface $QABQ = QAQBQ$ para todos $A, B \in \mathcal{A}$.

Proposición 5.1. *La transformación lineal*

$$M_f \Omega_0 \mapsto \sigma(f) \cdot 1, \quad f \in C_0(\mathbb{R}).$$

Se extiende de manera única a una isometría W de $L_2(\mathbb{R})$ en $L_2(\Omega)$. Además W satisface

$$P_{s_1} M_{f_1} P_{s_2} M_{f_2} \dots P_{s_n} M_{f_n} = W^\dagger U_{s_1} \sigma(f_1) U_{s_2} \sigma(f_2) \dots U_{s_n} \sigma(f_n) W, \quad (2)$$

para $n \geq 1$ y para $s_i \in \mathbb{R}$, $s_i \geq 0$ y $f_i \in C_0(\mathbb{R})$.

Como consecuencia directa de la igualdad (2), se tiene que si A y B son operadores en el álgebra \mathcal{A} de la forma

$$A = U_{s_1} \sigma(f_1) U_{s_2} \sigma(f_2) \cdots U_{s_m} \sigma(f_m), \quad B = U_{t_1} \sigma(g_1) U_{t_2} \sigma(g_2) \cdots U_{t_n} \sigma(g_n),$$

donde $s_i, t_i \geq 0, g_i, f_i \in C_0(\mathbb{R})$, entonces

$$W^\dagger A W W^\dagger B W = W^\dagger A B W.$$

También como consecuencia de la Proposición anterior se tiene el siguiente resultado.

Corolario 5.2. *El rango de W es un subespacio semi-invariante para el álgebra de operadores \mathcal{A} .*

Es decir, si $W : L_2(\mathbb{R}) \rightarrow L_2(\Omega)$ es una isometría y si E es la proyección sobre $W(L_2(\mathbb{R}))$ entonces $E = W W^\dagger$.

Procederemos ahora a construir el semigrupo de contracciones $\{Q_t\}_{t \geq 0}$, que tendrá a $-\hat{H}$ como su generador infinitesimal y además $Q_t^\dagger = Q_t \quad \forall t \geq 0$.

Para cada $t \geq 0$ definamos el funcional (cociclo) $C_t : \Omega \rightarrow (0, \infty)$ mediante

$$C_t(\omega) = e^{-\int_0^t V(\omega(s)) ds}.$$

La familia $\{C_t\}_{t \geq 0}$ tiene las siguientes propiedades:

- (i) $0 < C_t(\omega) \leq 1, C_0(\omega) = 1, \omega \in \Omega$;
- (ii) $C_{t+s}(\omega) = C_s(\omega) C_t(\tau_s \omega)$, (propiedad de cociclo).

Proposición 5.3. *Las condiciones (i) y (ii) son suficientes para que la familia $A_t = M_{C_t} U_t$ sea un semigrupo de contracciones en $L_2(\Omega)$. Además, $A_t \in \mathcal{A}$ para cada $t \geq 0$.*

Sea E la proyección $W W^\dagger$. Puesto que $\{M_{C_t} U_t : t \geq 0\}$ es un semigrupo en \mathcal{A} y por el Corolario, $W(L_2(\mathbb{R})) \subset L_2(\Omega)$ es un subespacio semi-invariante de \mathcal{A} , tenemos que

$$E M_{C_{s+t}} U_{s+t} E = E M_{C_s} U_s M_{C_t} U_t E = E M_{C_s} U_s E M_{C_t} U_t E.$$

De aquí se sigue que la familia de operadores $\{Q_t : t \geq 0\}$ en $L_2(\mathbb{R})$, definidos por

$$Q_t = W^\dagger M_{C_t} U_t W = W^\dagger A_t W,$$

es un semigrupo de contracciones fuertemente continuo. Con un poco más de trabajo se ve que $Q_t^\dagger = Q_t$; es decir, Q_t es autoadjunto para cada $t \geq 0$.

Siendo $\{Q_t\}_{t \geq 0}$, un semigrupo fuertemente continuo tiene un generador infinitesimal $-\hat{H}$, que será una extensión de $-(H_0 + V)$. Es decir,

$$e^{-t\hat{H}} = Q_t \quad \text{o bien} \quad e^{-t\hat{H}} = W^\dagger M_{C_t} U_t W. \quad (3)$$

La ecuación (3) es la fórmula de Feynman-Kac para perturbaciones del oscilador armónico cuántico en términos de álgebras de operadores.

Si en la ecuación (3) $V \equiv 0$, entonces $C_t \equiv 1$ y tenemos

$$P_t = e^{-tH_0} = W^\dagger U_t W.$$

Es decir, el semigrupo del oscilador armónico P_t tiene una dilatación generada por el grupo de traslaciones U_t en el espacio de probabilidad (Ω, P) .

En el caso en que $V \neq 0$, podemos decir que el semigrupo perturbado $e^{-t\hat{H}}$ tiene una dilatación de la forma $M_{C_t} U_t$, que es una perturbación de $(U_t)_{t \in \mathbb{R}}$ a través del cociclo C_t el cual fue definido en términos de V .

Referencias

- [1] R. P. Feynman, *Space-time approach to nonrelativistic quantum mechanics*, Rev. Modern Physics **20**, (1948), 367–387.
- [2] M. Kac, *On some connections between probability theory and differential equations*, Proc. 2nd Berk. Symp. Math. Statist. Probability, (1950), 189–215.
- [3] Accardi L. Quantum Probability: An introduction to some basic ideas and trends, en “Modelos Estocásticos II”, Aportaciones Mat. Investigación **16**, (2000), 1–128.
- [4] Arveson W. Ten Lectures on Operator Algebras, Conference Board of the Mathematical Sciences by the AMS, Vol. 55; Providence, R. I. 1983.
- [5] Gaxiola G. O. Dos Álgebras de Operadores Relacionadas con la Dinámica del Oscilador Armónico Cuántico. Tesis de Maestría en Matemáticas; UAM-Iztapalapa, México D.F. 2001.

- [6] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, II, Fourier Analysis, Self-Adjointness*, Academic Press, New York, 1975.
- [7] B. Simon, *Functional Integration and Quantum Physics*, Academic Press, New York, 1979.
- [8] Sarason D. *On spectral sets having connected complement*, *Acta Sci. Math. (Szeged)* **26** (1975), 289–299.