- *Scott, W.J.* 1957. "Water relations of food spoilage micro-organisms". Adv. Food Res. 7, 83.

- *Whitaker, J.R.* 1974. "Food related enzymes". Advances in chemistry series 136. American Chemical Society. Washington.

Anales de la Facultad de Química, Montevideo, Uruguay. Vol. 8, 1978 (129-145)

SOBRE LA ESTADISTICA EN MECANICA CUANTICA (I). LA DEFINICION DE VALOR MEDIO

O. VENTURA*

Una de las verdades más profundamente aceptadas por los estudiantes de química que reciben una instrucción básica, intrínsecamente no completa, de teoría cuántica, consiste en creer que el Deus ex Machina de esta disciplina es la ecuación de Schrödinger. Esta errada concepción del tema, proviene de que pocas veces se aclara suficientemente (aun en los libros de texto) la diferencia fundamental que existe entre la teoría cuántica abstracta y lo que se acostumbra a llamar mecánica cuántica o más exactamente mecánica ondulatoria. Usualmente es esta última disciplina la que se enseña, dado que luego será utilizada como base para la comprensión de los poderosos métodos químico-cuánticos.

De cualquier forma, parece evidente que podría ser beneficiosa una comprensión más profunda, para aquellos que estén interesados, de las bases de la teoría cuántica, teniendo en cuenta la forma notable en que es posible captar la lógica del tema al ser reducido a la aplicación de métodos matemáticos suficientemente conocidos.

Nos limitaremos en este primer artículo al estudio de un aspecto especial de la mecánica ondulatoria (es decir la teoría cuántica una vez admitidas ciertas proposiciones que estableceremos más adelante), el aspecto estadístico y más concretamente, analizaremos el postulado de la definición de valor medio de un observable en un estado dado de un sistema físico.

Recordemos en primer lugar algunos hechos conocidos de estadística.[1] Dado un cierto conjunto Ω, y una σ-algebra de conjuntos de Ω, α, se define la probabilidad $\mathscr{P}$ como una medida[2] sobre α tal que se cumple $\mathscr{P}(\Omega) = 1$. Se dice entonces que la

---

* Cátedra de Química Cuántica.

terna $(\Omega, \alpha, \mathscr{P})$ de un espacio muestral Ω, una σ-algebra α y una medida de probabilidad $\mathscr{P}$, es un espacio de probabilidad. En este espacio tienen importancia las funciones llamadas variables aleatorias (VA), cuya definición más sencilla es que son funciones reales medibles con respecto a la σ-algebra. Cada variable aleatoria X tiene asociada una función de distribución $\mathscr{F}(x)$ definida como $\mathscr{F}(x) \equiv \mathscr{P}(x \leq x)$. Con la notación usual de la integral de Lebesgue-Stieltjes[2] tenemos

$$\mathscr{F}(x) \equiv \mathscr{P}(x \leq x) = \int_{-\infty}^{x} d\mathscr{P} \tag{1}$$

Si existe una función f tal que se cumple

$$f(x) = \mathscr{F}'(x) \tag{2}$$

se dice que X es una VA continua y podemos expresar la integral de Lebesgue en 1) como una integral de Riemman

$$\mathscr{F}(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x)\, dx \tag{3}$$

Dentro de este marco se define el valor medio de la variable aleatoria X como

$$E(x) = \int_{\mathbb{R}^n} x\, d\mathscr{F}(x) \tag{4}$$

y en el caso de que la función de distribución $\mathscr{F}(x)$ sea continua con función densidad f(x) tenemos

$$E(x) = \int_{\mathbb{R}^n} x\, f(x)\, dx \tag{5}$$

Todo esto que hemos dicho hasta ahora se generaliza sin ninguna dificultad al caso en que las variables aleatorias sean multidimensionales.

Veamos ahora cuál es la situación en la mecánica cuántica. Supongamos que tenemos un sistema físico descrito por una función de onda ψ (por el momento nos supondremos dentro de los postulados de la mecánica ondulatoria, aun sin haberlos especificado explícitamente). Esta es en general compleja y por lo tanto no puede asignársele como función densidad de ninguna variable aleatoria. Sin embargo, el cuadrado de su mó-

dulo, $|\psi|^2$ es una cierta función real. Según la escuela de Copenhagen, esta función representa la función densidad de probabilidad asociada a una VA y que describe la posición de una partícula (o de un sistema de partículas) en una determinada región V del espacio de configuración. Por lo tanto, y según la definición de función de distribución, la probabilidad de que el sistema se encuentre en la región V estará dada por la integral

$$\mathscr{P}(Y \subset V) = \int_V |\psi|^2\, d\tau \tag{6}$$

donde por $Y \subset V$ entendemos el hecho de que el sistema se encuentre en dicha región y por $\int_V d\tau$ entendemos la integración sobre las coordenadas del espacio de configuración en la región V.

Dada la definición de $|\psi|^2$ como función densidad relacionada con una VA que describe la posición de un sistema en el espacio de configuración, el valor medio de una coordenada, q, del espacio de configuración, estará dado por

$$E(q) = \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^{3n-1}} q\, |\psi|^2\, d\tau\, dq\,, \tag{7}$$

n los grados de libertad del sistema, y donde por más claridad hemos indicado explícitamente los límites de integración para q. (Nada hemos dicho todavía acerca de la existencia de las integrales (6) y (7) pero esto se verá más adelante).

Aunque esto parece suficientemente claro, no lo es tanto la extrapolación realizada para definir el valor medio de un observables W cuyo operador asociado es $\mathscr{W}$. Según este principio el valor medio de W, E(W) está dado por

$$E(W) = \int \psi^*\, \mathscr{W}\, \psi\, d\tau \tag{8}$$

Esta última fórmula, si se considera que la variable es q y el operador (multiplicativo) asociado es q puede ser escrita como

$$E(q) = \int \psi^*\, q\, \psi\, d\tau = \int q\, \psi^* \psi\, d\tau = \int q\, |\psi|^2\, d\tau$$

que es la fórmula (7). Lo que no es evidente es que de esta coincidencia aparezca intuitivo postular la fórmula (8) para cualquier operador. Esto es debido a que la forma que tiene la integral, ya sea (7) o del tipo (8), es indiferente dado que el operador es multiplicativo, lo cual no sucede en la mayoría de los casos de interés.

Por esto parece conveniente encontrar una forma del postulado que aparezca menos dudosa que la que usualmente se da. Por tanto lo que sigue a continuación es, más que una demostración matemática rigurosa, una *mostración* físico-matemática del camino lógico a seguir para la deducción de la fórmula (8).

La mecánica ondulatoria como problema matemático.

El aceptar la mecánica ondulatoria como punto de partida impone ciertas restricciones a la teoría general. Tanto la teoría cuántica como la mecánica clásica pueden ser consideradas como parte de una teoría más general cuya base es la consideración de los sistemas físicos como sujetos de operaciones de medida. Con ello es posible la construcción de sistemas proposicionales cuya estructura resulta ser un retículo modular ortocomplementado y atómico, distributivo en el caso de la mecánica clásica y compatible en el caso de la teoría cuántica[3,4].

Se encuentra, por otra parte, que esta estructura puede representarse con el espacio de Hilbert abstracto, asociando los operadores de proyección ortogonales en este último con las proposiciones del retículo[5].

Si de todas las realizaciones posibles del espacio de Hilbert se elige aquélla de las funciones de cuadrado integrables según Lebesgue ($\mathscr{L}^2$) se obtiene lo que comúnmente se conoce como mecánica ondulatoria. En lo que sigue, entonces, aceptaremos dos principios:

a) El estado de un sistema físico puede ser descrito apropiadamente (es decir completamente) por una función ψ tal que la integral

$$I = \int |\psi|^2 \, d\tau$$

es finita (la integración extendida a todo el espacio de configuración).

b) Un observable V está representado por un operador hermítico $\mathscr{V}$ en el espacio $\mathscr{L}^2$.

Hechas estas precisiones podemos pasar a algunas definiciones que nos serán útiles.

DEFINICIONES MATEMATICAS

Espacio de Banach.

Un espacio de Banach es un espacio normado, completo en la métrica inducida por la norma.

NOTA:

Recordar que el hecho de ser completo implica que toda sucesión de Cauchy converge en él. En particular el espacio de Hilbert es un espacio de Banach con la norma inducida por el producto interno.

Algebra de Banach.

Un álgebra de Banach es un espacio de Banach B donde se define una operación. que satisface

a) $\mathscr{H}(\mathscr{F}\cdot\mathscr{G}) = (\mathscr{H}\cdot\mathscr{F})\cdot\mathscr{G}$

b) $(\mathscr{H}+\mathscr{F})\cdot\mathscr{G} = \mathscr{H}\cdot\mathscr{G}+\mathscr{F}\cdot\mathscr{G}$
$\mathscr{H}\cdot(\mathscr{F}+\mathscr{G}) = \mathscr{H}\cdot\mathscr{F}+\mathscr{H}\cdot\mathscr{G}$

c) $a(\mathscr{H}\cdot\mathscr{G}) = (a\,\mathscr{H})\cdot\mathscr{G} = \mathscr{H}\cdot(a\,\mathscr{G})$ para todo a complejo

d) $\|\mathscr{H}\cdot\mathscr{G}\| \leq \|\mathscr{H}\|\,\|\mathscr{G}\|$

e) existe $\mathscr{I} / \mathscr{H}\cdot\mathscr{I} = \mathscr{I}\cdot\mathscr{H} = \mathscr{H}$

f) $\|\mathscr{I}\| = 1 \quad (\forall\, \mathscr{H}, \mathscr{F}, \mathscr{G} \in B)$

Operador.

Sean A y B dos espacios vectoriales sobre el mismo campo (no necesariamente distintos) y $\mathscr{T}$ sea una aplicación de A sobre

B tal que para todo elemento a de A existe un elemento b de B tal que se cumple

$$\mathfrak{T}a = \mathfrak{T}(a) = b$$

Diremos entonces que $\mathfrak{T}$ es un operador.

Operador lineal.

Sean a, a' elementos de un espacio vectorial A y b, b' elementos de un espacio vectorial B y $\mathfrak{T}$ un operador de A sobre B tal que se cumple $\mathfrak{T}a = b$ y $\mathfrak{T}a' = b'$. Si se verifica

$$\mathfrak{T}(\alpha a + \beta a') = \alpha b + \beta b' \qquad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

decimos que $\mathfrak{T}$ es un operador lineal.

Operador acotado.

Un operador $\mathfrak{T}$ cuyo dominio es $\mathbb{D}$ será acotado si se cumple, para un determinado K perteneciente a los reales,

$$\|\mathfrak{T}\psi\| \leq K\|\psi\| \qquad K \in \mathbb{R}$$
$$\psi \in \mathbb{D}$$

NOTA:

En lo siguiente asumiremos que

$$K = \operatorname{Sup}\{\|\mathfrak{T}\psi\| / \psi \in \mathbb{D}, \|\psi\| \leq 1\}$$

siempre que el número exista y llamaremos a K la norma del operador.

Teorema.

Sea $B(\mathcal{L}^2)$ el conjunto de todos los operadores lineales acotados: $\mathfrak{T}: \mathcal{L}^2 \longrightarrow \mathcal{L}^2$ en el espacio de Hilbert (con la cota dada en la nota anterior). Entonces $B(\mathcal{L}^2)$ es un álgebra de Banach (la demostración de este teorema puede verse en el apéndice).

Automorfismo involutivo.

Diremos que en el álgebra de Banach $B(\mathcal{L}^2)$ existe un automorfismo involutivo $\dagger: B(\mathcal{L}^2) \longrightarrow B(\mathcal{L}^2) / \dagger(\mathfrak{T}) = \mathfrak{T}^\dagger$ para todo

$\mathfrak{T}$ perteneciente a $B(\mathcal{L}^2)$ si se cumple

a) $\mathfrak{T}^\dagger \in B(\mathcal{L}^2)$

b) $(\mathfrak{T} + \mathcal{G})^\dagger = \mathfrak{T}^\dagger + \mathcal{G}^\dagger$

c) $(a\,\mathfrak{T})^\dagger = a^*\,\mathfrak{T}^\dagger$

d) $(\mathfrak{T} \cdot \mathcal{G})^\dagger = \mathcal{G}^\dagger \cdot \mathfrak{T}^\dagger$

e) $(\mathfrak{T}^\dagger)^\dagger = \mathfrak{T}^\dagger$

para todo $\mathcal{G}$ perteneciente a $B(\mathcal{L}^2)$ y a perteneciente al campo complejo, ($\mathbb{C}$, el asterisco implica la compleja conjugada).
En general en mecánica cuántica los operadores son integro-diferenciales o bien multiplicativos. Adoptamos entonces como automorfismo la conjugación compleja, (junto con la propiedad (d)).

Operador normal.

Decimos que $\mathfrak{T} \in B(\mathcal{L}^2)$ es normal si se cumple

$$\mathfrak{T} \cdot \mathfrak{T}^\dagger = \mathfrak{T}^\dagger \cdot \mathfrak{T}$$

Operador hermítico.

Decimos que $\mathfrak{T} \in B(\mathcal{L}^2)$ es hermítico si se cumple

$$\mathfrak{T}^\dagger = \mathfrak{T}$$

Operador de proyección.

Decimos que $\mathfrak{T} \in B(\mathcal{L}^2)$ es un operador de proyección si se cumple

$$\mathfrak{T} \cdot \mathfrak{T} = \mathfrak{T}$$

Operador invertible.

Sea $\mathfrak{T} \in B(\mathcal{L}^2)$ $\mathfrak{T}$ es invertible si existe $\mathcal{S}$ $B(\mathcal{L}^2)$ tal que se cumple

$$\mathfrak{T} \cdot \mathcal{S} = \mathcal{S} \cdot \mathfrak{T} = \mathcal{I}$$

donde $\mathcal{I}$ es el operador identidad de $B(\mathcal{L}^2)$.

Espectro de un operador.

El espectro de un operador $\mathcal{T} \in B(\mathcal{L}^2)$ es el conjunto $\Lambda(\mathcal{T})$ de todos los escalares λ tales que el operador $\mathcal{T} - \lambda\mathcal{I}$ no es invertible siendo $\mathcal{I}$ el operador identidad de $B(\mathcal{L}^2)$.

NOTA:

Si $\mathcal{T} - \lambda\mathcal{I}$ no es invertible por no ser una relación biunívoca se dice que λ es un valor propio del operador $\mathcal{T}$.

Resolución de la identidad.

Sea $\mathfrak{a}$ una σ-álgebra en un conjunto Ω. Definimos la resolución de la identidad $\mathcal{E}$ sobre $\mathfrak{a}$ como una aplicación $\mathcal{E}:\mathfrak{a} \to B(\mathcal{L}^2)$ tal que se cumple

a) $\mathcal{E}(\phi) = \mathcal{O}$ (ϕ es el conjunto vacío y $\mathcal{O}$ el operador nulo)

b) $\mathcal{E}(\Omega) = \mathcal{I}$

c) $\mathcal{E}$ es un operador de proyección hermítico.

d) $\mathcal{E}(\omega' \cap \omega'') = \mathcal{E}(\omega') \cdot \mathcal{E}(\omega'')\ \forall\ \omega', \omega'' \in \mathfrak{a}$

e) si $\omega' \cap \omega'' = \phi$ entonces

$\mathcal{E}(\omega' \cup \omega'') = \mathcal{E}(\omega') + \mathcal{E}(\omega'')\ \forall\ \omega', \omega'' \in \mathfrak{a}$

f) para todo $\psi, \psi' \in \mathcal{L}^2$ entonces $(\mathcal{E}(\omega)\psi, \psi')$ es una medida en $\mathfrak{a}$.

Se ve entonces que hemos provisto al conjunto de operadores lineales acotados de una estructura probabilística asociada. Dado que $(\mathcal{E}(\omega)\psi, \psi)$ es una medida y $\mathcal{E}(\Omega) = 1$ si (ψ, ψ) está adecuadamente normalizado (y si no lo está puede serlo por definición) se cumple que $(\mathcal{E}(\omega)\psi, \psi)$ es una probabilidad y entonces $\Omega, \mathfrak{a}, (\mathcal{E}(\omega)\psi, \psi)$ es un espacio de probabilidad. Lo que hemos logrado es asociar a cada operador una medida y por lo

tanto (como Ω y $\mathfrak{a}$ no dependen de él) cada operador tiene asociado un espacio de probabilidad propio, punto que queda asegurado por el siguiente teorema que afirma la existencia de una única descomposición de la unidad asociada a cada operador).

Algo que debe notarse aquí es que esta definición de la descomposición de la unidad para operadores lineales acotados es un tanto restringida y aunque no insistiremos en ello puede extenderse para tener en cuenta que también existe una única descomposición de la unidad para operadores hermíticos aunque no sean acotados y también puede extenderse para operadores no acotados cuyo dominio sea todo $\mathcal{L}^2$ y que sean cerrados (es decir su grafo, el conjunto de los pares ordenados $\{\psi\ \mathcal{T}\psi\}$ con ψ perteneciente a $\mathcal{L}^2$, sea un subespacio cerrado de $\mathcal{L}^2 \times \mathcal{L}^2$ mediante el teorema del grafo cerrado (ver referencia (5) página 50).

Teorema espectral.

(Forma i)

Si $\mathcal{T} \in B(\mathcal{L}^2)$ y es normal existe una única descomposición de la unidad $\mathcal{E}$ en los subconjuntos de Borel de $V(\mathcal{T})$ (que forman una σ álgebra) que satisface

a) si $\mathcal{S}$ es un operador conmutable con $\mathcal{T}$ cada proyección $\mathcal{E}$ conmuta con $\mathcal{S}$

b) si ψ pertenece al dominio de $\mathcal{T}$ entonces

$$(\mathcal{T}\psi, \psi) = \int_{\Lambda(\mathcal{T})} \lambda \, d(\mathcal{E}_\lambda \psi, \psi)$$

(Forma ii)

Sea $\mathcal{T}$ un operador hermítico. Entonces existe una única descomposición de la unidad $\mathcal{E}$ en los subconjuntos de Borel de $\mathbb{R}^*$ que se cumple

a) $\mathcal{E}$ es permutable $\mathcal{T}$ con y con cada operador permutable con.

b) El dominio de $\mathcal{T}$ es el conjunto de elementos ψ para los cuales la integral

$$\int_{\mathbb{R}^*} \lambda^2 \, d(\mathcal{E}_\lambda \psi, \psi)$$

es finita.

c) si ψ pertenece al dominio de $\mathscr{T}$ entonces

$$(\mathscr{T}\psi, \psi) = \int_{\mathbb{R}^*} \lambda \, d(\mathscr{E}_\lambda \psi, \psi)$$

NOTA:

Véase que en la segunda forma del teorema no pedimos que los operadores sean acotados, mientras que la primera forma pide que el operador pertenezca a $B(\mathscr{L}^2)$. Esto corresponde a la extensión de que hablabamos anteriormente. Además se observa que en la segunda forma del teorema la medida se toma igual a cero en los puntos de $\mathbb{R}^*$ que no pertenecen al espectro del operador. (Las demostraciones de estos teoremas pueden encontrarse respectivamente en las referencias (5) y (6)).

Obviamente, el lector atento en este punto habrá comprendido fácilmente que el resultado al cual queremos llegar es que para un observable al cual se le asocia el operador hermítico $\mathscr{R}$ el valor medio en un estado ψ del sistema estará dado por

$$E(R) = (\mathscr{R}\psi, \psi) \tag{9}$$

El paso que nos falta dar es ver cómo a partir de la fórmula (6) aparece natural postular la relación (9).

Para ello supongamos que $q_1, q_2, \ldots, q_k$ son las coordenadas en el espacio de configuración. Llamemos V a un cubo k-dimensional definido por las relaciones (10)

$$\begin{array}{ccccc} a_1 & < & q_1 & \leqslant & b_1 \\ a_2 & < & q_2 & \leqslant & b_2 \\ \cdot & & \cdot & & \\ \cdot & & \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot & & \cdot \\ a_k & < & q_k & \leqslant & b_k \end{array} \tag{10}$$

Los operadores asociados a las coordenadas q_i son operadores multiplicativos y hermíticos y su descomposición de la unidad (única por la segunda forma del teorema espectral) está dada por

$$\mathscr{E}_{j\lambda}\, \psi(q_1, q_2, \ldots, q_k) = \begin{cases} \psi(q_1, \ldots, q_k) & q_j \leqslant \lambda \\ 0 & q_j > \lambda \end{cases}$$

donde el subíndice j hace referencia al operador q_j y llamemos

$$\mathscr{E}(\Delta) \equiv \mathscr{E}((a', b']) = \mathscr{E}(b') - \mathscr{E}(a')$$

Con esta definición $\mathscr{E}(\Delta)$ es un operador de proyección $(b' > a')$ y la probabilidad de que el sistema se encuentre en V (sus coordenadas cumplan las desigualdades (10)) es

$$\int_V |\psi(q_1 \ldots q_k)|^2 \, d\tau = \int |\mathscr{E}_1(\Delta_1) \ldots \mathscr{E}_k(\Delta_k)\psi|^2 \, d\tau$$

donde $\mathscr{E}_j(\Delta_j) = \mathscr{E}_j((a_j, b_j])$ y $\int d\tau$ es la integral sobre todo el espacio de configuración. Recordando que en el espacio de Hilbert la norma es la inducida por el producto interno tenemos

$$\int |\mathscr{E}_1(\Delta_1) \ldots \mathscr{E}_k(\Delta_k)\psi|^2 \, d\tau = \| \mathscr{E}_1(\Delta_1) \ldots \mathscr{E}_k(\Delta_k)\psi \|^2 \tag{11}$$

En vista de este resultado efectuamos el siguiente postulado fundamental.

POSTULADO FUNDAMENTAL.

La probabilidad de que en el estado ψ los observables a los que corresponden los operadores hermíticos $\mathscr{T}_1, \mathscr{T}_2, \ldots, \mathscr{T}_n$, tomen valores contenidos en los intervalos $\Delta_1, \Delta_2, \ldots, \Delta_n$, respectivamente es

$$\mathscr{P} = \| \mathscr{E}_1(\Delta_1) \ldots \mathscr{E}_k(\Delta_k)\psi \|^2$$

donde $\mathscr{E}_{i\lambda}$ es la descomposición de la unidad correspondiente al operador $\mathscr{T}_i$.

El único punto oscuro que puede plantearse de la extensión de (11) al postulado fundamental es el orden de los operadores $\mathscr{E}_i(\Delta_i)$ ya que en (11) estos son conmutables y en el caso general esto no sucede. Por tanto se entiende que el postulado fundamental es válido sólo para operadores permutables entre si, lo cual no es en realidad una limitación importante, dado que si los operadores no conmutan los observables respectivos no son simultáneamente medibles y en consecuencia no tiene sentido hablar de una probabilidad conjunta para estas magnitudes. En el caso de considerar válido el postulado fundamental para operadores conmutables se deduce del teorema espectral que los $\mathscr{E}_i$ permutan entre sí y el producto es un operador de proyección como se ve fácilmente. Por ser esto así y cumplirse para un operador de proyección $\mathscr{X}$

$$\mathscr{X} \cdot \mathscr{X} = \mathscr{X}$$

obtenemos

$$\mathscr{P} = (\mathscr{E}_1(\Delta_1) \cdot \mathscr{E}_2(\Delta_2) \dots \mathscr{E}_\ell(\Delta_\ell)\psi, \psi) \qquad (12)$$

Este importante resultado lo usaremos ahora para deducir el valor medio de un operador.

Sea F una magnitud física (observable) $\mathscr{F}$ y su operador asociado y dividamos $\mathbb{R}^1$ en una cantidad numerable de intervalos $(\lambda_i, \lambda_{i+1})$ $i = 0 \pm 1 \pm 2$. La probabilidad de que el observable F tome un valor dentro del intervalo $\Delta_i \equiv (\lambda_i, \lambda_{i+1}]$ es, por el postulado fundamental y la fórmula (12) en el caso de un solo operador (por lo cual la permutabilidad no juega ningún papel).

$$(\mathscr{E}(\Delta_i)\psi, \psi) \equiv ((\mathscr{E}_{\lambda_{i+1}} - \mathscr{E}_{\lambda_i})\psi, \psi) = (\mathscr{E}_{\lambda_{i+1}}\psi, \psi) - (\mathscr{E}_{\lambda_i}\psi, \psi)$$

El valor medio de la magnitud en el intervalo estará dado por

$$E_{\Delta_i}(F) = \bar{\lambda}_i \left((\mathscr{E}_{\lambda_{i+1}}\psi, \psi) - (\mathscr{E}_{\lambda_i}\psi, \psi)\right) \qquad \bar{\lambda}_i \in (\lambda_i, \lambda_{i+1})$$

y en $\mathbb{R}^1$ por la suma

$$E(F) = \sum_{-\infty}^{+\infty} E_{\Delta_i}(F) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \bar{\lambda}_i \left((\mathscr{E}_{\lambda_{i+1}}\psi, \psi) - (\mathscr{E}_{\lambda_i}\psi, \psi)\right)$$

Tomando el límite de la expresión cuando Δ_i tiende a cero obtenemos la integral de Lebesgue-Stieltjes (es $(\mathscr{E}_\lambda \psi, \psi)$ una medida)

$$E(F) = \int_{\mathbb{R}^1} \lambda \, d(\mathscr{E}_\lambda \psi, \psi)$$

y por el teorema espectral concluimos

$$E(F) = (\mathscr{F}\psi, \psi)$$

con lo cual reencontramos la fórmula del valor medio comúnmente usada en los libros de mecánica cuántica (es decir la fórmula (8)).

CONCLUSIONES.

Resumiendo, vemos que el camino para obtener la fórmula (8) a partir del hecho de que $|\psi|^2$ representa la función densidad asociada a la VA que describe la posición de un sistema en el espacio de configuración puede adecuadamente esquematizarse como sigue. En primer lugar se parte de la fórmula que representa la probabilidad de encontrar el sistema en una determinada región del espacio de configuración y se deduce una expresión en función de las descomposiciones de la unidad de los operadores asociados a las coordenadas. Luego se generaliza este resultado mediante el postulado fundamental. Debe observarse que con el postulado que se introduce de esta forma ya no es necesario postular $|\psi|^2$ como función densidad pues ello se deduce de aquél. Finalmente se reduce el postulado al caso de un único operador para el cual se determina el valor medio en un intervalo y finalmente pasando al límite se obtiene una integral que por el teorema espectral se sabe que es igual al producto interno de la función de estado ψ por ser transformada por el operador.

Debe observarse que, como ya dijimos, los postulados no son independientes y es suficiente uno de ellos para deducir el otro y consiguientemente los resultados de este artículo (aunque en todo caso el postulado fundamental es más amplio que el otro) pero la justificación de ellos mismos como postulados sólo puede encontrarse a niveles más profundos de la teoría.

AGRADECIMIENTO.

Deseo agradecer al Prof. Roberto Kreimerman por las útiles sugerencias y valiosas discusiones acerca de este artículo.

APENDICE.

$B(\mathscr{L}^2)$ es un álgebra de Banach. (La demostración de que $B(\mathscr{L}^2)$ es un espacio de Banach véase en Dieudonne (8)).

1) Definimos

$$(\mathscr{G}\cdot\mathscr{F})(\psi) = \mathscr{G}(\mathscr{F}(\psi))$$

$$\forall\ \mathscr{G},\mathscr{F} \in B(\mathscr{L}^2) \quad \forall\ \psi \in \mathscr{L}^2$$

Tenemos entonces

a) $(\mathscr{H}\cdot(\mathscr{G}\cdot\mathscr{F}))(\psi) = \mathscr{H}((\mathscr{G}\cdot\mathscr{F})(\psi)) =$

$$= \mathscr{H}(\mathscr{G}(\mathscr{F}(\psi))) = (\mathscr{H}\cdot\mathscr{G})(\mathscr{F}(\psi)) =$$

$$= ((\mathscr{H}\cdot\mathscr{G})\mathscr{F})(\psi)$$

b) $((\mathscr{H}+\mathscr{F})\cdot\mathscr{G})(\psi) = (\mathscr{H}+\mathscr{F})(\mathscr{G}(\psi)) =$

$$= \mathscr{H}(\mathscr{G}(\psi)) + \mathscr{F}(\mathscr{G}(\psi)) =$$

$$= (\mathscr{H}\cdot\mathscr{G})(\psi) + (\mathscr{F}\cdot\mathscr{G})(\psi)$$

$$(\mathscr{H}\cdot(\mathscr{F}+\mathscr{G}))(\psi) = \mathscr{H}((\mathscr{F}+\mathscr{G})(\psi)) =$$

$= \mathscr{H}(\mathscr{F}(\psi) + \mathscr{G}(\psi)) =$] linealidad de $\mathscr{H}$ [$=$

$$= \mathscr{H}(\mathscr{F}(\psi)) + \mathscr{H}(\mathscr{G}(\psi)) = (\mathscr{H}\cdot\mathscr{F})(\psi) + (\mathscr{H}\cdot\mathscr{G})(\psi)$$

c) $a(\mathscr{H}\cdot\mathscr{F})(\psi) = a\,\mathscr{H}(\mathscr{F}(\psi)) = ((a\,\mathscr{H})\mathscr{F})(\psi)$

$a(\mathscr{H}\cdot\mathscr{F})(\psi) = a\,\mathscr{H}(\mathscr{F}(\psi)) =$] linealidad de $\mathscr{H}$ [$=$

$$= \mathscr{H}(a\,\mathscr{F}(\psi)) = (\mathscr{H}\cdot(a\,\mathscr{F}))(\psi)$$

d) $\|\mathscr{H}\cdot\mathscr{G}\| = \operatorname{Sup}\{\|(\mathscr{H}\cdot\mathscr{G})(\psi)\| / \psi \in \mathscr{L}^2, \|\psi\| \le 1\}$

$$\|\mathscr{H}\cdot\mathscr{G}\| \le \operatorname{Sup}\{\|\mathscr{H}(\phi)\| / \phi \in \mathscr{L}^2, \|\phi\| \le 1\}\,\|\mathscr{G}(\psi)\| \le$$

$$\le \operatorname{Sup}\{\|\mathscr{H}(\phi)\| / \phi \in \mathscr{L}^2, \|\phi\| \le 1\}\ \operatorname{Sup}\{\|\mathscr{G}(\psi)\| / \psi \in \mathscr{L}^2, \|\psi\| \le 1\}\,\|\psi\|$$

$$\Rightarrow \operatorname{Sup}\{\|(\mathscr{H}\cdot\mathscr{G})(\psi)\| / \psi \in \mathscr{L}^2, \|\psi\| \le 1\} \le$$

$$\le \operatorname{Sup}\{\|\mathscr{H}\|\,\|\mathscr{G}\|\,\|\psi\| / \psi \in \mathscr{L}^2, \|\psi\| \le 1\} =$$

$$= \{\|\mathscr{H}\|\,\|\mathscr{G}\|\,\|\psi\| / \psi \in \mathscr{L}^2, \|\psi\| = 1\} =$$

$$= \|\mathscr{H}\|\,\|\mathscr{G}\|$$

$$\Rightarrow \|\mathscr{H}\cdot\mathscr{G}\| \le \|\mathscr{H}\|\,\|\mathscr{G}\|$$

2) Definiendo

$$\mathscr{I}(\psi) \equiv \psi$$

$\mathscr{I} \in B(\mathscr{L}^2)$ porque: 1 $\quad \mathscr{I}(a\psi + b\psi') \equiv a\psi + b\psi' =$

$$= a\mathcal{T}(\psi) + b\mathcal{T}(\psi') \Rightarrow \text{lineal}$$

ii) $$\operatorname{Sup}\{\|\mathcal{T}(\psi)\| / \psi \in \mathcal{L}^2, \|\psi\| \leqslant 1\} =$$

$$= \operatorname{Sup}\{\|\psi\| / \psi \in \mathcal{L}^2, \|\psi\| \leqslant 1\} =$$

$$\|\psi\|_{\|\psi\| = 1} = 1 \text{ acotado}$$

Entonces

a) $$(\mathcal{H}\cdot\mathcal{T})(\psi) = \mathcal{H}(\mathcal{T}(\psi)) \equiv \mathcal{H}(\psi) \equiv \mathcal{T}(\mathcal{H}(\psi)) = (\mathcal{T}\cdot\mathcal{H})(\psi)$$

$$\Rightarrow \mathcal{H}\cdot\mathcal{T} = \mathcal{H} = \mathcal{T}\cdot\mathcal{H}$$

b) $$\|\mathcal{T}\| = \operatorname{Sup}\{\|\mathcal{T}(\psi)\| / \psi \in \mathcal{L}^2, \|\psi\| < 1\} = 1$$

$$\Rightarrow \|\mathcal{T}\| = 1$$

BIBLIOGRAFIA

1. *G. Birkhoff, J. von Neumman*, 1936, Ann. Math. 37, 823.
2. *W. Feller*, 1971, An Introduction to Probability Theory and its applications, Vol II, John Wiley & Sons, Inc. Ney York, 2nd Ed.
3. *P. R. Halmos*, 1974, Measure Theory, Springer-Verlag, New York, 2nd Ed.
4. *a) J. M. Jauch*, 1964, Helvetica Phys. Acta 37, 293.
   b) C. Piron, Ibid. 37, 439.
5. *B A. Lengyel*, Functional Analysis for Quantum Theorists en: Advances in Quantum Chemistry, Vol 4, P. O. Loewdin (Ed.), 1968.
6. *J. von Neumman*, 1949, Fundamentos matemáticos de la Mecánica Cuántica, Publicaciones del Instituto de Matemáticas «Jorge Juan», Madrid.
7. *W. Rudin*, 1973, Functional Analysis, Mc. Graw Hill, New York.
8. *J. Dieudonné*, 1976, Fundamentos de Análisis Moderno, Reverté, Barcelona.