
HISTORIA

Sección a cargo de

José Ferreirós Domínguez¹

Despedida del editor

A lo largo de cuatro años, he tenido el gusto de editar esta Sección de Historia en LA GACETA DE LA RSME. Llega el momento de decir adiós, o mejor hasta luego, y pasar el relevo. A propuesta mía y de Antonio Durán (quien también fuera editor de la Sección durante 5 años), el encargado de proseguir esta tarea será Jesús Hernández, de la Univ. Autónoma de Madrid, quien a lo largo de muchos años ha ejercido un papel de relevancia promoviendo la buena historia de las matemáticas en nuestro país.

Desde un principio, los editores de esta Sección hemos tenido muy presente la responsabilidad de cuidarla con especial esmero. No es igual la situación en España de las distintas subdisciplinas matemáticas y la de la historia de las matemáticas, de donde se deriva la necesidad de darle un tratamiento diferenciado a la segunda. Esta es una revista que sirve a la comunicación entre los matemáticos que hablan nuestra lengua, y ofrece contenidos de alta divulgación para asuntos matemáticos. Pero en el caso que nos ocupa, el reto es utilizarla como vía para “poner al día la visión que de la historia de la matemática tienen sus lectores” (como decía yo mismo en un escrito programático que apareció en el Vol. 6.1 (2003), págs. 103-111). Quiero decir con esto que el objetivo es algo más ambicioso que la alta divulgación, e incluye también la formación.

A lo largo de estos cuatro años, se han publicado artículos que discutieron la obra de diversos matemáticos, desde Fermat y Newton hasta Gödel y los Bourbaki. No hemos olvidado las conexiones entre matemáticas y ciencias físicas, que tuvieron una fuerte presencia. Los autores se han repartido casi a partes iguales entre españoles y extranjeros, incluyendo figuras de la relevancia internacional de Erhard Scholz y Leo Corry, por citar sólo a dos. Ni que decir tiene que agradezco profundamente a todos estos colegas su desinteresada aportación. Y espero que otros buenos colegas que nos enviaron ilusionados sus escritos y esperaron con paciencia (en ocasiones mucha paciencia) una respuesta, para finalmente ver rechazada su publicación, sepan perdonar a

¹Los interesados en colaborar con esta sección pueden dirigir sus contribuciones a la siguiente dirección: José Ferreirós Domínguez; Departamento de Filosofía y Lógica, Universidad de Sevilla; C/ Camilo José Cela, s/n; 41018 – Sevilla; Correo electrónico: josef@us.es

este editor: los estándares de calidad que he tratado de aplicar fueron altos, no en interés de ninguna persona concreta, sino en interés de la disciplina.

Por mi parte, espero que tras las siembras vengan las cosechas, y confío de manera especial en que veamos incrementada la presencia de la historia de las matemáticas en los nuevos títulos de Matemáticas y de Enseñanza de las matemáticas. De nuevo, no en interés de ningún grupo o gremio, sino por una convicción profunda de que esa presencia servirá para mejorar los conocimientos matemáticos, y en suma la situación de las matemáticas en nuestro país. (Un tema, por cierto, sobre el que remito a un informe aprobado por el CEMAT, que se recoge en su *Boletín* 2005.2, págs. 4-5, disponible en la web <http://www.ce-mat.org/>).

José Ferreirós

De la equivalencia matemática entre la Mecánica Matricial y la Mecánica Ondulatoria

por

Carlos M. Madrid Casado

*First I was in Göttingen, then in Oxford and Cambridge.
Now I am suffering from indigestion caused by the endless
Heisenberg–Born–Dirac–Schrödinger sausage-machine-physics-mill.*

Paul Ehrenfest en carta a Einstein del 26 de agosto de 1926

INTRODUCCIÓN

Este pasado año 2006 se han cumplido exactamente ochenta años del “descubrimiento” o “invención” por mano de Schrödinger de la equivalencia matemática entre Mecánicas Cuánticas (1926-2006). Históricamente, tanto los padres fundadores de la Mecánica Cuántica (véase, por ejemplo, Schrödinger (1982, 46) o Heisenberg (1972, 90)) como prestigiosos físicos cuánticos (p. ej. Bohm (1989, 383)), filósofos e historiadores de la física (Jammer (1989, 271) o Sánchez Ron (2001, 466)) han dado por supuesto que la equivalencia entre la Mecánica Matricial de Heisenberg y la Mecánica Ondulatoria de Schrödinger quedó demostrada por el propio Schrödinger en su artículo “Über das Verhältnis der Heisenberg–Born–Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen” y, simultáneamente, por Eckart en “Operator Calculus and the Solution of the Equation of Quantum Dynamics”, unificándose ambos modelos matemáticos a partir de los trabajos de Dirac. Sin embargo, cuando se acude a tales artículos y se estudian con gafas de historiador de la matemática, se detectan numerosas imprecisiones que invalidan la prueba de equivalencia. A nuestro entender, hay que esperar hasta 1932 (¡¡seis años después!!) para encontrar la primera prueba consistente de equivalencia y la primera unificación rigurosa de la Mecánica Matricial y de la Mecánica Ondulatoria en una Mecánica Cuántica más universal y abstracta: nos referimos al tiempo en que von Neumann dio a conocer su monumental obra *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* (por cierto, libro traducido al español antes que al inglés).

La excepción que confirma la regla es Muller (1997a y 1997b), con el que reconocemos nuestra deuda, pese a distanciarnos en el enfoque de la cuestión: Muller no sólo desenmascara la prueba de Schrödinger sino que niega que ambas mecánicas fueran matemática y hasta empíricamente equivalentes en su tiempo, llegando a hablar de un “mito de la equivalencia”, mientras que nosotros vamos a mantener que Schrödinger, efectivamente, falló en la demostración pero no en la conjetura de lo que había que demostrar, y con ello dio

inicio a un proceso de clarificación conceptual que cerraría la cuestión de la equivalencia pasado el tiempo.

La finalidad de este trabajo es doble. Por un lado, regresar en el tiempo a la primavera de 1926 para aclarar cómo realmente transcurrió la búsqueda de equivalencia matemática entre Mecánicas Cuánticas. Por otro, arrojar luz sobre la aplicación del Análisis Funcional en la Física Cuántica, haciendo honor a las palabras de Bohr (1964, 84): “en nuestra disertación no consideraremos las matemáticas puras como rama separada del conocimiento, sino más bien como un refinamiento del lenguaje común, al que proporcionan los medios adecuados de enunciar relaciones para las cuales la expresión verbal ordinaria es imprecisa o embarazosa”. En definitiva, nuestro objetivo no es otro que dilucidar la evolución histórica de las matemáticas de la Mecánica Cuántica².

LAS MATEMÁTICAS DE LA MECÁNICA MATRICIAL

El origen heroico de la teoría de los quanta se remonta al 14 de diciembre de 1900, cuando Planck presentó su ley de radiación del cuerpo “negro” ante la *Physikalische Gesellschaft*. Su hipótesis meramente formal de que la emisión y la absorción de energía sólo toman lugar en porciones discretas supuso la primera revolución científica de las tres que vislumbraría la Física del siglo XX (Teoría Cuántica, Teoría Relativista y Teoría del Caos). El *dramatis personae* de la “prehistoria” de la Mecánica Cuántica (1900-1925) incluye, amén de a Planck, los nombres de Einstein o Bohr. Einstein refrendaría la Ley de Planck desde consideraciones comprehensivas y Bohr aplicaría las ideas planckianas en la construcción de su modelo atómico. Sin embargo, pese a estos hitos, entre 1900 y 1925 (tiempo en que da comienzo la “historia” de la Mecánica Cuántica con el establecimiento de los cimientos de su formalismo), la teoría de los cuantos fue un puente sobre aguas turbulentas, pues consistía en un confuso batiburrillo de hipótesis, leyes, principios y recetas de cálculo. Las reglas de manejo de las cantidades cuánticas se fundaban en que la física clásica debía presentarse como caso límite de la nueva microfísica, es decir, la nueva teoría debía converger a la clásica cuando el cuanto de acción se hiciera infinitamente pequeño. Entre tales reglas, destacaba el llamado “principio de correspondencia” de Bohr. Sin embargo, el uso de estas técnicas *ad hoc* provocaba malestar. En palabras de Max Born: “We became more and more convinced that a radical change of the foundations of physics was necessary, i. e. a new kind of mechanics for which we used the term quantum mechanics” (van der Waerden: 1968, 20).

²Dado que nuestra tesis acerca de quién, cómo y cuándo se prueba la equivalencia matemática entre Mecánicas Cuánticas contradice lo comúnmente aceptado, habremos de mancharnos las manos con algún cálculo para apoyarla, sobre todo si queremos hacer historia de las matemáticas. En ese momento, a fin de no entorpecer demasiado la lectura del artículo, remitiremos al lector al Apéndice matemático.



Figura 1. Werner Heisenberg y Niels Bohr

Por fin, Heisenberg (1925) sentó las bases de la Mecánica Cuántica. Del mismo modo que en la expresión de Fourier del movimiento clásico especificar las frecuencias y amplitudes de las ondas luminosas emitidas por el átomo era equivalente a especificar la trayectoria del electrón, Heisenberg concibió que tal conjunto de números también podría considerarse una descripción completa del sistema dentro de la nueva mecánica, aunque ya no fuera posible interpretarlo en el sentido de una trayectoria electrónica puesto que debían emplearse únicamente cantidades observables (como eran esas magnitudes de radiación frente a las inobservables posición y velocidad del electrón). Es decir, Heisenberg obtuvo qué magnitud cuántica (Q ó P) había que sustituir por cada magnitud clásica (q ó p). En especial, comprobó que las cantidades cuánticas generalmente no conmutaban, a diferencia de las clásicas ($QP \neq PQ$ pero $qp = pq$).

Poco tiempo después, Born y Jordan (1925) reconocieron que los conjuntos de números heisenbergianos Q ó P se comportaban como matrices, pese a que el propio Heisenberg no sabía ni lo que era una matriz según confesó: “Ahora los ilustrados matemáticos de Gotinga hablan mucho de matrices hermíticas, pero yo ni siquiera sé lo que es una matriz” (Bombal: 1999, 125). La casualidad del fortuito encuentro Born–Jordan en la estación de ferrocarriles de Hannover dio alas al programa matricial. Al año siguiente, trabajando codo con codo junto a Heisenberg, los “Tres Hombres” darían con la llamada *condición cuántica exacta*:

$$PQ - QP = \frac{h}{2\pi i} I.$$

Única ecuación del formulario básico propuesto por Born, Heisenberg y Jordan (1926) en que entraba en juego la constante de Planck. Con ella, y considerando una matriz hamiltoniana $H(Q, P)$ obtenida a partir del hamiltoniano clásico mediante sustitución de las variables clásicas de posición y momento por sus respectivas matrices, dedujeron las *ecuaciones canónicas del movimiento*:

$$\begin{cases} \dot{Q} &= \frac{\partial H}{\partial P} \\ \dot{P} &= -\frac{\partial H}{\partial Q} \end{cases}$$

Por último, mostraron cómo reducir el problema de integrar estas ecuaciones a una formulación matemáticamente conocida: un problema mecánico-matricial consistía en diagonalizar la matriz H , ya que los elementos diagonales o espectrales $\sigma(H)$ representaban los valores energéticos. A resultas de esta maravillosa coincidencia, el *espectro* matemático de Hilbert (un nombre que él eligió casi por casualidad) acabaría siendo central para explicar los *espectros* físicos de los átomos (Dieudonné: 1982, 171). Desafortunadamente, las matrices que aparecían eran de orden infinito y la resolución de este *problema de diagonalización* no resultaba tan sencilla como en el caso finito³. Además, para rizar el rizo, estas matrices eran habitualmente no acotadas, pero los “Tres Hombres” dieron por válidos resultados análogos a los que Hilbert y Hellinger habían demostrado para acotadas (von Neumann -¡cómo no!- acabaría probando años más tarde que tal suposición era, en efecto, correcta).

Los fenómenos que la Mecánica Matricial tuvo que salvar fueron las tablas de datos entresacadas de la investigación experimental con espectros atómicos. Felizmente, Pauli (1926) consiguió deducir el espectro del hidrógeno dentro del marco mecánico-matricial. Sin embargo, la labor teórica de Heisenberg-Born-Jordan sufrió una fría acogida a causa de su mística (pero inspirada) heurística: “Gottinga está dividido en dos grupos -argüía Heisenberg ante Pauli en carta del 16 de noviembre de 1925-, aquellos que, como Hilbert (o también Weyl, en una carta a Jordan), hablan del gran éxito alcanzado mediante la introducción del cálculo de matrices en física; y aquellos otros que, como Franck, dicen que nunca serán capaces de entender las matrices” (Mehra & Reichenberg: 1982, 231). A una sintaxis extraña (álgebra matricial) se sumaba una interpretación semántica todavía más descorazonadora. Pese a lo que suele leerse⁴, la concepción básica de la Mecánica Matricial no era corpuscular. En efecto, todo corpúsculo presupone una precisa localización espacio-temporal, pero Heisenberg desde el principio renunció a considerar inobservables cinemáticos como la posición o la velocidad del electrón⁵. Tanto Heisenberg como Pauli dudaban de la realidad de las partículas. Por contra, Born y Jordan mantenían la existencia de partículas, en cuanto hipótesis necesaria para explicar los experimentos de colisiones atómicas llevados a cabo por Franck. En cualquier caso, bajo esta disparidad de opiniones, siempre hubo consenso en que los principales referenciales de la ontología mecánico-matricial no eran sino los parámetros electromagnéticos (frecuencias e intensidades de radiación), que quedaban recogidos como entradas matriciales.

³Para matrices hermíticas de tamaño finito siempre puede hallarse una transformación diagonalizadora. Desgraciadamente, para matrices hermíticas infinitas, el fenómeno del espectro continuo hace acto de presencia.

⁴Cf. Jammer (1989, 270) o Rioja (1995, 120). Beller (1983, 470) constituye una honrosa excepción.

⁵De hecho, Kornel Lanczos llegaría a señalar que la variable temporal no representaba papel protagonista alguno, más allá del meramente simbólico.



Figura 2. Los “Tres Hombres”: Werner Heisenberg, Max Born y Pascual Jordan

LAS MATEMÁTICAS DE LA MECÁNICA ONDULATORIA

Hacia finales del año 25, los pilares de la Mecánica Matricial estaban puestos. A diferencia de los jóvenes físicos y matemáticos de Gotinga y Copenhague, pero al igual que gran parte de la comunidad científica, Schrödinger no se sentía cómodo con la Mecánica Cuántica de Heisenberg: “I naturally knew about his theory, but was discouraged, if not repelled, by what appeared to me as very difficult methods of transcendental algebra, and by the want of perspicuity (*Anschaulichkeit*)” (Schrödinger: 1982, 46 n. p. 1). Guiado por la búsqueda de una teoría más visualizable y que sólo empleara herramientas matemáticas clásicas (las ecuaciones diferenciales *de siempre* en lugar de las *mágicas* matrices), Schrödinger descubrió su celebrada ecuación de ondas en la Navidad de ese año. Con los primeros meses de 1926, los cuatro artículos que constituyeron el núcleo de la Mecánica Ondulatoria vieron la luz.

La idea genial que plasmó Schrödinger (1926a) fue estudiar el movimiento del electrón mediante la consideración de un cierto movimiento ondulatorio, derivado de un problema variacional, cuya función de onda sería el sustituto cuántico de la descripción clásica del sistema físico. Con más precisión: reemplazó las ecuaciones fundamentales de la mecánica y las viejas condiciones cuánticas por una ecuación de ondas en un espacio de configuración abstracto, en un espacio funcional. Esta metodología precipitó en la famosa *ecuación de ondas de Schrödinger*⁶:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \psi(x) = 0$$

⁶Por simplicidad, y como inicialmente hizo Schrödinger, sólo mencionamos la versión independiente del tiempo (por tanto, sólo nos referiremos a estados atómicos estacionarios, es decir, con energía bien definida); tras obtenerla, Schrödinger llegó a una ecuación dependiente del tiempo, más general, que sí describe todos los estados atómicos posibles sin necesidad de que sean estacionarios.

Equivalentemente, si identificamos la expresión correspondiente al operador hamiltoniano $\tilde{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$, nos queda la ecuación de autovalores de tal operador:

$$\tilde{H}\psi = E\psi$$

Originariamente, Schrödinger pidió que la *función de onda* ψ fuese continua y de recorrido real. Estas restricciones poco a poco fueron abandonándose, pues bastaba con que ψ fuera compleja de cuadrado integrable (para poder interpretarlo como una densidad de carga eléctrica difuminada por todo el espacio), en otras palabras, que perteneciera al espacio de funciones:

$$L^2 = \left\{ f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C} \mid f \text{ medible y } \|f\|_2 = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)f(x) dx \right)^{1/2} < +\infty \right\}$$

(Históricamente, indica Dieudonné (1981, 120), este espacio apareció explícitamente en 1907, cuando independientemente Riesz y Fischer descubrieron el egregio teorema que lleva sus nombres y del que hablaremos más adelante.) Así pues, un problema mecánico-ondulatorio consistía en resolver la ecuación diferencial de Schrödinger o, equivalentemente, el problema de autovalores asociado al operador hamiltoniano, ya que estos valores propios representaban los valores observables de la energía (i. e. el espectro $\sigma(\tilde{H}) = \{E_n\}$); además, de propina, las respectivas autofunciones $\{\varphi_n\}$ representaban los estados atómicos estacionarios dentro del marco mecánico-ondulatorio⁷. Desgraciadamente, cuando se tomaban en cuenta estados atómicos no estacionarios o que evolucionan con el tiempo, múltiples dificultades salían al paso. De nuevo, aparecía el fenómeno del espectro continuo ($\sigma(\tilde{H})$ dejaba de ser un conjunto discreto para convertirse en un continuo), y cabía la posibilidad de que la colección de autofunciones $\{\varphi_n\}$ no constituyera un sistema ortogonal *completo*. Ya Schrödinger contempló estas importantes patologías matemáticas⁸, advirtiéndole que se presentaban tanto en el caso del átomo de hidrógeno como en átomos más pesados.

Finalmente, Schrödinger (1926a) logró deducir los niveles energéticos del átomo de hidrógeno dentro de su teoría. La labor investigadora de Schrödinger tuvo una acogida excepcional. Por varios motivos: primero, porque resolver una ecuación diferencial (*problema mecánico-ondulatorio*) –algo que los físicos matemáticos habían realizado durante siglos– parecía *a priori* más sencillo que diagonalizar una matriz infinita (*problema mecánico-matricial*); y segundo, porque la Mecánica de Schrödinger resultaba más intuitiva y visualizable

⁷Esto suponía una gran ventaja de la Mecánica de Schrödinger frente a la de Heisenberg, porque, atención, esta última no disponía de término teórico alguno que representara a los propios estados atómicos dentro del modelo matemático (cf. Beller (1983, 479-481)).

⁸Si no fuera posible expresar ψ como una serie de φ_n 's, una parte sustancial de la interpretación ondulatoria de la función *de ondas* quedaría apoyada en el vacío.

que la Mecánica de Heisenberg–Born–Jordan. A la seria ventaja que suponía que en la Mecánica de Ondas sí existía un término matemático –la función de onda– candidato a representar los estados atómicos –de otro modo, a diferencia de la Mecánica de Matrices, sí había un *espacio de estados*: L^2 –, se sumó que Schrödinger venció los prejuicios positivistas que imperaban en Heisenberg y se atrevió a ofrecer una interpretación física bastante natural: las partículas debían pensarse como ondas materiales, a la manera de las ondas electromagnéticas o las ondas del sonido⁹. De hecho, Sommerfeld pasó, en menos de un mes, de sostener que el método de Schrödinger no tenía ningún sentido a mantener que había venido en socorro de los físicos.



Figura 3. Erwin Schrödinger

LAS “PRUEBAS” DE EQUIVALENCIA MATEMÁTICA DE 1926

El panorama que se les presentaba a los físicos cuánticos a comienzos de la primavera de 1926 difícilmente podía resultar más chocante: disponían de dos modelos matemáticos muy distintos que, curiosamente, realizaban idénticas predicciones físicas. (Esta perplejidad que debían sentir y que se prolongaría en el tiempo queda muy bien reflejada en la cita de Ehrenfest que encabeza este trabajo). Mientras que la Mecánica Matricial conllevaba un enfoque *algebraico* (porque se utilizaban matrices y el problema paradigmático consistía en diagonalizar una matriz), la Mecánica Ondulatoria presentaba un enfoque

⁹No podemos entrar en ello, porque nuestra historia atañe a la matemática de la Mecánica Cuántica antes que a su interpretación, pero esta concepción se revelaría inadecuada, como Bohr y Heisenberg le hicieron saber a Schrödinger en su visita otoñal del 26 a Gotinga (si los electrones fuesen ondas, se difundirían por todo el espacio, pero siempre se nos muestran como puntos en las pantallas de detección).

analítico (se empleaban funciones de onda y el problema paradigmático residía en resolver una ecuación diferencial). Además, la Mecánica de Matrices acentuaba el carácter discontinuo¹⁰, mientras que la Mecánica de Ondas ponía énfasis en los aspectos continuos, apoyándose en una concepción ondulatoria del microcosmos. Si Schrödinger calificaba la Mecánica Matricial de contrainintuitiva, Heisenberg llegaba a escribir en carta a Pauli: “Cuanto más pienso en los aspectos físicos de la teoría de Schrödinger, más repulsiva me parece [...] lo que Schrödinger dice de la visualización de su teoría ‘no es probablemente cierto del todo’ [alusión a un comentario de Bohr], en otras palabras: es una mierda [sic]” (Fernández-Rañada: 2004, 89-90). Y, sin embargo, ambas mecánicas explicaban y predecían igual.

De hecho, fue mérito de Hilbert reconocer la profunda similitud entre ambas teorías, como ilustra el siguiente testimonio de Edward U. Condon, que visitó Gotinga en 1926:

Hilbert se rió mucho de Born y Heisenberg porque, cuando descubrieron la Mecánica de Matrices, se encontraron con el mismo tipo de dificultades que, por supuesto, todo el mundo encuentra al manipular y tratar de resolver problemas con matrices [infinitas]. Cuando fueron a pedir ayuda a Hilbert, éste les dijo que las únicas veces que había tenido que ver con matrices fue cuando éstas aparecían como subproducto del estudio de autovalores de una ecuación diferencial con condiciones de contorno. Les sugirió que si encontraban la ecuación diferencial que originaba esas matrices, probablemente obtendrían más información. Heisenberg y Born pensaron que era un comentario para salir del paso, y que Hilbert no sabía realmente de lo que estaba hablando. Así que más tarde Hilbert se divirtió mucho, indicándoles que podían haber descubierto la Mecánica Ondulatoria de Schrödinger seis meses antes que éste, si le hubieran hecho caso (Jammer: 1989, 280 n. p. 37).

Sin saberlo, en su esclarecedor artículo¹¹ sobre la relación entre ambas mecánicas, Schrödinger recogió el testigo de Hilbert:

Considering the extraordinary differences between the starting-points and the concepts of Heisenberg's quantum mechanics and of the theory

¹⁰Conviene no olvidar que Born y Jordan (1925) afirmaban: “The new mechanics presents itself as an essentially discontinuous theory” (van der Waerden: 1968, 300); pese a que Heisenberg no se casaba con una *visión* corpuscular del mundo atómico.

¹¹Queda para otra ocasión estudiar la prueba que Pauli ideó en carta a Jordan del 12/4/26. La de Schrödinger se publicó en *Annalen der Physik* el 4/5/26, pero se recibió el 18/3/26, *ergo* éste no tuvo conocimiento de la prueba similar de aquél (Sánchez Ron: 2001, 468). Tampoco entramos en detallar la prueba de Eckart, recibida el 7/6/26 en *Physical Review*: Max Born llegó a Pasadena llevando bajo el brazo los rudimentos de la Mecánica Matricial, lo que excitó la curiosidad de Carl Eckart y precipitó en su prueba de equivalencia, elaborada independientemente de la de Schrödinger-Eckart (1926, 726) confesaba desconocerla- pero también similar.

which has been designated “undulatory” or “physical” mechanics, and has lately been described here, it is very strange that these two new theories agree *with one another* with regard to the known facts, where they differ from the old quantum theory. [...] That is really very remarkable, because starting-points, presentations, methods, and in fact the whole mathematical apparatus, seem fundamentally different. [...] In what follows the very intimate *inner connection* between Heisenberg’s quantum mechanics and my wave mechanics will be disclosed. From the formal mathematical standpoint, one might well speak of the *identity* of the two theories (Schrödinger: 1982, 45-6).

A manera de preliminar, Schrödinger (1926b) introdujo el uso de operadores en su Mecánica Ondulatoria. Asoció los operadores $\tilde{Q} = x$ y $\tilde{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ a las variables clásicas q y p , motivado porque obedecían la relación de conmutación $\tilde{P}\tilde{Q} - \tilde{Q}\tilde{P} = \frac{\hbar}{2\pi i}\tilde{1}$, en efecto:

$$-i\hbar \left(\frac{\partial(x\psi)}{\partial x} - x \frac{\partial\psi}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{2\pi i}\psi$$

Del mismo modo, asoció el operador $\tilde{F} = F(\tilde{Q}, \tilde{P})$ -que él denotó literalmente por “[$F, \cdot$]”- a la función clásica $F(q, p)$, poniendo énfasis en que no se alterase el orden en que aparecen sus factores q ’s y p ’s (pues éstos conmutan mas sus operadores no). En especial, tal coordinación podía establecerse, como ya ejemplificamos, para la función hamiltoniana: si en el caso clásico $H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$, se obtenía $\tilde{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ ¹².

A continuación, empleando esto como herramienta, Schrödinger procedió a conectar las funciones *continuas* de la Mecánica Ondulatoria con las matrices *discretas* de la Mecánica Matricial:

I will first show [...] how to each function of the position- and momentum-co-ordinates there may be related a matrix in such a manner, that these matrices, *in every case, satisfy* the formal calculating rules of Born and Heisenberg (among which I also reckon the so-called “quantum condition” or “interchange rule”) (Schrödinger: 1982, 46).

A cada función de la Mecánica Ondulatoria, vía su operador (hermítico) $\tilde{F} = F(\tilde{Q}, \tilde{P})$, le asoció cierta matriz (hermítica) $F = F(Q, P)$ de la Mecánica Matricial. Elegido arbitrariamente un sistema ortogonal completo de funciones

¹²En realidad, la introducción de operadores ya había sido materializada por Born y Wiener a finales de otoño del 25, llegando a definir el operador *momento* como derivada parcial respecto de la *posición*; pasado el tiempo, Born se lamentaría: “I never will forgive myself [...] we would have had the whole wave mechanics from quantum [matrix] mechanics at once, a few months before Schrödinger” (Jammer: 1989, 231).

$\{\varphi_k\}$, Schrödinger consideró -por decirlo en lenguaje matemático de hoy día- el siguiente morfismo algebraico¹³:

$$\begin{aligned} \Theta_{\{\varphi_k\}} : (\tilde{Q}, \tilde{P}) &\longrightarrow (Q, P) \subseteq \{\text{matrices}\} \\ \tilde{F} &\longmapsto F = (F_{mn}) = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^*(x) \tilde{F}(\varphi_n)(x) dx \right) \end{aligned}$$

En sus propias palabras: “a matrix element is computed by *multiplying* the function of the orthogonal system denoted by the *row*-index [...] by the result arising from using our operator in the orthogonal function corresponding to the *column*-index, and then by *integrating* the whole over the domain” (Schrödinger: 1982, 48-49). Con esto, ya sabía qué matrices hacer corresponder a los operadores *posición, momento y hamiltoniano*:

$$\begin{aligned} \tilde{Q} \xrightarrow{\Theta} Q &= (Q_{mn}) = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^*(x) x \varphi_n(x) dx \right) \\ \tilde{P} \xrightarrow{\Theta} P &= (P_{mn}) = \left(-i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \varphi_n(x) dx \right) \\ \tilde{H} \xrightarrow{\Theta} H &= (H_{mn}) = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \varphi_n(x) dx \right) \end{aligned}$$

Además, este morfismo algebraico respetaba la suma y el producto, es decir, transformaba suma/producto de operadores en suma/producto de matrices, y llevaba los operadores identidad y nulo a las matrices identidad y nula:

$$\begin{aligned} \Theta_{\{\varphi_k\}}(\tilde{F} + \tilde{G}) &= F + G \\ \Theta_{\{\varphi_k\}}(\tilde{F} \cdot \tilde{G}) &= F \cdot G \\ \Theta_{\{\varphi_k\}}(\tilde{1}) &= I \\ \Theta_{\{\varphi_k\}}(\tilde{0}) &= O \end{aligned}$$

En particular, estas propiedades implicaban la satisfacción de la relación cuántica de conmutación, que ya anunciaba Schrödinger:

$$\Theta_{\{\varphi_k\}} \left(\tilde{P}\tilde{Q} - \tilde{Q}\tilde{P} = \frac{\hbar}{2\pi i} \tilde{1} \right) = \left(PQ - QP = \frac{\hbar}{2\pi i} I \right)$$

Hasta ese momento, Schrödinger sabía cómo construir matrices desde operadores, pero: ¿cómo construir operadores desde matrices?, es decir, ¿cómo

¹³El dominio del morfismo es el álgebra generada por los operadores de Schrödinger, y su rango es el álgebra generada por las matrices de Heisenberg (contenidas en el espacio ambiente de todas las matrices de la Mecánica Matricial). El morfismo está bien definido porque cada integral es finita, en módulo, al no ser más que el producto escalar de dos elementos del espacio de Hilbert de funciones de cuadrado integrable (por no complicar, obviamos que el dominio de los operadores ondulatorios no suele ser todo este espacio sino sólo un subconjunto denso).

recorrer el camino inverso? Matemáticamente, la cuestión era si su morfismo algebraico era, en realidad, isomorfismo. Sorprendentemente, Schrödinger ofrecía contestación a esta espinosa cuestión en una nota a pie de página (!). Atendiendo a la acción genérica ($\dagger$) de un operador sobre una función de onda:

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n \Rightarrow \tilde{F}(\psi) = \tilde{F} \left(\sum_n c_n \varphi_n \right) = \sum_n c_n \tilde{F}(\varphi_n) = \sum_n c_n \sum_m F_{mn} \varphi_m$$

la fórmula ($\dagger$) sugería¹⁴ un posible camino de regreso desde la matriz hasta el operador, es decir, una posible vía de definición del morfismo inverso $\Theta_{\{\varphi_k\}}^{-1}$, que capacitaría para, dada la matriz F , recuperar el operador $\tilde{F}$. En efecto, en ($\dagger$) se suponen conocidos los elementos matriciales F_{mn} y, gracias a ellos, recuperaríamos cierto operador $\tilde{F}$ definido en función de la matriz F tal y como se enuncia en ($\dagger$). Ahora bien, dada cualquier matriz F :

1º) ¿Existe siempre un operador $\tilde{F}$ correspondiente a F de acuerdo a la fórmula ($\dagger$)? Es decir, ¿es sobreyectiva $\Theta_{\{\varphi_k\}}$?

2º) ¿Existe, a lo sumo, sólo un operador correspondiendo a una misma matriz? Es decir, ¿es inyectiva $\Theta_{\{\varphi_k\}}$?

Si ambas preguntas poseyesen respuesta afirmativa, quedaría garantizado que nuestro morfismo es realmente isomorfismo, existiendo una correspondencia biunívoca entre operadores ondulatorios y matrices. Comencemos dando respuesta a la segunda cuestión: como estudiaron Hilbert y Courant, supuesto que exista el operador $\tilde{F}$ correspondiente a la matriz F (esto es, suponiendo afirmativa la contestación a la primera pregunta), los coeficientes F_{mn} del desarrollo ($\dagger$) determinan de modo único su operador $\tilde{F}$; en palabras de Schrödinger: “certainly *not more than one* linear differential operator can belong to a given *matrix*, according to our connecting law” (1982, 52 n. p. 1).

Sin embargo, la respuesta a la primera cuestión es negativa, dando al traste con nuestras expectativas de isomorfismo. En efecto, dada una matriz F , resulta necesario que sea una matriz de Wintner –i. e. que sus filas y columnas sean de cuadrado sumable– para que exista un operador $\tilde{F}$ definido por ($\dagger$), pero las matrices consideradas por Heisenberg–Born–Jordan no tienen por qué ser *a fortiori* de Wintner –Muller (1997a, 53) concuerda–. (Véase Apéndice.) Propiamente, Schrödinger ya se percató de ello: “we have not proved that a linear operator, corresponding to an arbitrary matrix, *always exists*” (1982, 52 n. p. 1).

¹⁴ Obsérvese, en el paso intermedio de ($\dagger$), la admisión implícita de conmutatividad de $\tilde{F}$ con $\sum$, i. e. de continuidad del operador respecto de la convergencia considerada; y, en el último paso, la admisión de otro desarrollo en serie.

Y esto es clave. Mediante $\Theta_{\{\varphi_k\}}$ cualquier problema de la Mecánica Ondulatoria podía convertirse en un problema de la Mecánica Matricial¹⁵, pero no recíprocamente. Durante el periodo fundacional de la Mecánica Cuántica, resultaba concebible una matriz hamiltoniana sin operador hamiltoniano correspondiente y, por tanto, un problema físico sólo resoluble en la Mecánica de Heisenberg, que así manifestaría su superioridad frente a la Mecánica de Schrödinger.

Hagamos inventario de lo demostrado hasta este instante: no perdamos de vista que Schrödinger *sólo* ha probado que su Mecánica de Ondas es traducible a la Mecánica de Matrices. Sorprendentemente, hacia el final de su artículo, Schrödinger volvía a la carga:

The equivalence *actually* exists, and it also exists *conversely*. Not only can the matrices be constructed from the proper functions as shown above, but also, conversely, the functions can be constructed from the numerically given matrices. Thus the functions do not form, as it were, an *arbitrary* and *special* “fleshly clothing” for the bare matrix skeleton, provided to pander to the need for intuitiveness. This really would establish the superiority of the matrices, from the epistemological point of view (Schrödinger: 1982, 58).

Pero, atención, Schrödinger no iba a volver sobre $\Theta_{\{\varphi_k\}}^{-1}$, sino que, presuponiendo su existencia, hacía hincapié en que al transitar este camino de regreso desde la Mecánica Matricial hasta la Mecánica Ondulatoria siempre se suponía fijado $\{\varphi_k\}$, es decir, siempre se daba por conocida esta noción ondulatoria. Era necesario, pues, ensayar un camino de regreso desde la Mecánica de Matrices que no dependiera de ninguna noción de la Mecánica de Ondas. Suponiendo que $Q_{mn} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^*(x)x\varphi_n(x)dx$ para cada m y n , como se conocían las entradas matriciales -¡el punto de partida era la Mecánica Matricial!-, se trataba de determinar las funciones $\{\varphi_k\}$ -¡el punto de llegada era la Mecánica Ondulatoria!-. A continuación, mediante multiplicación matricial, podían conocerse los valores de las integrales $\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^*(x)x^k\varphi_n(x)dx$, puesto que serían el elemento (mn) de la matriz $(Q_{mn})^k$. Se conocerían, pues, todos los “momentos” de la función $\varphi_m^*\varphi_n$ (fijados m y n), que, supuso Schrödinger, bajo condiciones muy generales, determinarían la función $\varphi_m^*\varphi_n$, en particular, φ_m^2 (tomando $m = n$), y, por tanto, φ_m . Lamentablemente, no es cierto en general que podamos encontrar φ_k conocidos sus “momentos”. La aseveración de

¹⁵Schrödinger (1982, 46): “The *special* system of algebraic equations [el problema de diagonalización] will be completely solved by assigning the auxiliary rôle to a *definite* orthogonal system, namely, to the system of *proper functions* of that partial differential equation which forms the basis of my wave mechanics”; debido a que $H_{mn} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^*(x)\hat{H}\varphi_n(x)dx = E_m\delta_{mn}$.

Schrödinger (1982, 58) de que “it is known that, under very general assumptions, a function is determined uniquely by the totality of its moments” no es del todo cierta, porque esas “very general assumptions” no se verifican en el caso que nos ocupa. Habida cuenta de que el “problema de los momentos de Hamburger” -que es una generalización del problema clásico de Stieltjes de finales del XIX- se planteaba cuando se integraba sobre toda la recta real, deberían satisfacerse las hipótesis del Teorema de Hamburger -¡probado sólo seis años antes (1920)!- (Akhiezer: 1965, v). Tristemente, no eran el caso: principalmente porque exige que f sea una función *real* y $\varphi_m^* \varphi_n$ puede tomar valores *complejos*¹⁶. De hecho, siguiendo a Shohat y Tamarkin (1943, 22), el “problema de los momentos de Schrödinger” estaría indeterminado (i. e. presentaría infinitas soluciones) hasta si tomamos una función de cuadrado integrable sencilla como $f(x) = e^{-\sqrt{|x|}}$, ya que somos incapaces de recuperarla a partir de sus “momentos”.

En resumidas cuentas, Schrödinger (1926b) no logró probar la equivalencia matemática entre la Mecánica Matricial y la Mecánica Ondulatoria por razones técnicas y conceptuales. Schrödinger logró probar que la Mecánica Ondulatoria está contenida en la Mecánica Matricial, pero fracasó a la hora de demostrar la otra inclusión (y si no se demuestra, el método matricial sería mejor que el método ondulatorio al comprenderlo). Con más precisión, su morfismo algebraico entre operadores ondulatorios y matrices no es, en realidad, isomorfismo: a cada operador ondulatorio le hace corresponder una matriz distinta (inyectividad); pero no asegura que a cada matriz le corresponda un operador ondulatorio (sobreyectividad) ya que *a priori* no toda matriz heisenbergiana habría de ser de Wintner. Además, su morfismo depende de un sistema ortogonal completo de autofunciones de onda y, a pesar de que Schrödinger porfíe, no es cierto en general que podamos recuperar funciones de onda a partir de entradas matriciales, de “momentos”, ya que el problema matemático de los momentos no admite necesariamente solución. Schrödinger vislumbró cierta correspondencia entre los operadores de la Mecánica Ondulatoria y las matrices de la Mecánica Matricial (entre *observables* diríamos hoy día empleando el vocabulario acuñado por Dirac), pero le faltó mostrar esa misma correspondencia entre las funciones de onda de la Mecánica Ondulatoria y algunos términos teóricos que jugasen análogo papel en la Mecánica Matricial (entre *estados* diríamos hoy). Pero esto último era imposible demostrarlo en 1926 al carecer la Mecánica Matricial de “espacio de estados”. Al revés que en la Mecánica de Schrödinger, los estados atómicos prescindían de contrapartida teórico-matemática en la Mecánica de Heisenberg, a causa de la obsesión positivista de su padre fundador, que los consideraba reliquias inobservables heredadas de la teoría cuántica antigua. Algo por lo que Bohr se mostró preocupado a Ralph Kronig en carta de 1926: “In the wave mechanics

¹⁶Muller (1997b, 233) muestra que de nada sirve aplicar el truco pueril de separar partes real e imaginaria.

we possess now the means of picturing a single stationary state [...] this is the very reason for the advantage which wave mechanics exhibits when compared to the matrix method” (Muller: 1997b, 226). Tiempo después, Dirac y von Neumann habrían de hacer frente a esta carencia.

A UN PASO DE LA EQUIVALENCIA MATEMÁTICA: DIRAC

Tras las “pruebas” -mejor: “pistas” o “indicios”- de equivalencia entre Mecánicas Cuánticas, sobrevino la necesidad de unificarlas. En el otoño de 1926, Dirac y Jordan sabían que ambas mecánicas eran -más o menos- matemáticamente equivalentes y elaboraron el modelo teórico conocido como Teoría de la Transformación para lograr la unificación de ambos formalismos. En esencia, la Teoría de la Transformación no era más que una amalgama de matemática matricial y ondulatoria que estudiaba aquellas transformaciones lineales que correspondían a las transformaciones canónicas de la Mecánica Clásica. Un pastiche que vería entorpecido su desarrollo con dificultades relacionadas con el hecho de que Schrödinger no había atinado a demostrar de modo adecuado la equivalencia entre las Mecánicas Matricial y Ondulatoria; pero que, a cambio, descubriría la senda por la que luego transitaría von Neumann para -por así decir- atar los numerosos cabos sueltos (así, él identificaría las transformaciones antedichas con los operadores unitarios del espacio de Hilbert). Habitualmente, múltiples filósofos e historiadores de la física cuántica sólo mencionan a Paul Adrien Maurice Dirac en relación con la Teoría de la Transformación, pero P. A. M. Dirac no fue su único hacedor. Pascual Jordan —uno de los *Tres Hombres*— también colaboró en su creación. A juicio de Fernández-Rañada (2004, 112), el injusto olvido de su nombre se debe a que era un judío conservador partidario de acuerdos con Hitler, que acabó incorporándose a las filas del partido nazi. Pero Jordan no puede ser olvidado, por cuanto también realizó importantes aportaciones al Análisis Funcional, pongamos por caso al problema de la isomorfía entre espacios de Banach y espacios de Hilbert (junto a von Neumann (1935) demostraría que un espacio de Banach es isométrico a un espacio de Hilbert si y sólo si verifica la ley del paralelogramo).

Dirac (1925) entendió que las cantidades teórico-cuánticas introducidas por Heisenberg definían un nuevo tipo de álgebra, para el que la multiplicación no era conmutativa. En consecuencia, decidió llamar *q*-numbers a las cantidades que se comportaban así, para distinguirlas de los *c*-numbers o cantidades que se comportan como los números de toda la vida¹⁷. Estas y otras ideas precipitarían en su archiconocido libro *The Principles of Quantum Mechanics*, publicado en Londres en 1930, y que sería sucesivamente corregido y aumentado en las posteriores ediciones de 1934 y 1947 (con, por ejemplo,

¹⁷Los prefijos *q*- y *c*- provienen de las iniciales de *quantum* y *classical* (Coutinho: 1997, 597).

la notación que los físicos denominan *bra/ket*). Dirac realizó una novedosa aportación: fue el pionero en establecer la distinción entre *estados* y *observables* del sistema físico-cuántico. Distinción que aparecía bastante nítida en la Mecánica Ondulatoria (funciones de onda/operadores), pero que brillaba por su ausencia en la Mecánica Matricial (donde sólo aparecían matrices); y, como advertimos, esto fue lo que produjo el fallo en la prueba de equivalencia de Schrödinger, pues él (casi) anudó la equivalencia entre observables (operadores) pero le quedó probar lo mismo para estados, mas como Bohr se interrogaba: ¿cuáles eran los candidatos a representar los estados del átomo en la Mecánica de Heisenberg? Dirac respondió al enigma. Pero, aunque ya dispuso de todas las piezas del rompecabezas, no atinó a hacerlas encajar, porque, como mostramos a continuación, las forzó demasiado en su intento de que casaran a la perfección. Sería John von Neumann el que resolvería el puzzle.

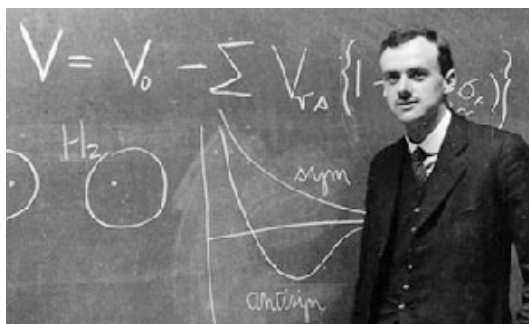


Figura 4. Paul Adrien Maurice Dirac

Recordemos que un *problema mecánico-matricial* consistía en un *problema de diagonalización*. Simbólicamente, dada la matriz H de energía de nuestro sistema físico, se trataba de determinar una *transformación* S (¡por esto se hablaba de Teoría de la Transformación!) tal que la matriz $W = S^{-1}HS$ se transformara en una matriz diagonal, puesto que así sus elementos diagonales nos facilitaban el conocimiento de los valores energéticos E_n del sistema. Si despejamos HS en nuestra ecuación matricial $W = S^{-1}HS$, nos queda $HS = SW$. Y si, con algo de cuidado y empleando la regla de multiplicación de matrices, escribimos lo que significa esta última ecuación para los números de cada matriz, obtenemos que el elemento sito en fila m y columna n de la matriz HS ha de ser igual al elemento sito en la misma fila y en la misma columna de la matriz SW , formalmente:

$$\sum_k h_{mk} s_{kn} = E_n s_{mn} \text{ para cada } m \text{ y } n \quad (\text{A})$$

Recordemos también que un *problema mecánico-ondulatorio* consistía en un *problema de autovalores*. Esto es, dado el operador $\tilde{H}$ de energía de nuestro

sistema físico, se trataba de resolver la *ecuación diferencial de Schrödinger*:

$$\tilde{H}\psi = E\psi$$

hallando los autovalores E_n solución. Si usamos la notación φ_n para la autofunción asociada al autovalor E_n , llegamos a:

$$\tilde{H}\varphi_n = E_n\varphi_n \text{ para cada } n \quad (\text{B})$$

Dirac, una vez que hubo reformulado los problemas arquetípicos de ambas mecánicas en los modos (A) y (B), procedió a compararlos y observó su evidente semejanza estructural...

$$\text{Hamiltoniano} \times XYZ = \text{Energía} \times XYZ$$

Siendo XYZ , en el caso matricial, la columna n de la matriz S y, en el caso ondulatorio, la autofunción n de onda. Seguidamente, Dirac se planteó: ¿qué condiciones hay que asumir para poder igualar término a término la ecuación (A) y la ecuación (B)? Primera condición, como explica Bombal (1999, 134), “la semejanza de los problemas (A) y (B) es evidente considerando s_{mn} como función de la “variable discreta” m [la Mecánica Matricial es el reino de lo discreto] y φ_n como función de la “variable continua” x [la Mecánica Ondulatoria es el reino de lo continuo]”. Entonces, aceptándolo, ya se sabe qué hacer corresponder a los *estados* de la Mecánica Ondulatoria en la Mecánica Matricial: efectivamente, a cada *autofunción* $\varphi_n(x)$ se le hará corresponder el *autovector* que viene dado por la columna n de la matriz S . De esta manera, de una vez por todas, Dirac descubrió cuáles eran los analogados matriciales de los estados atómicos estacionarios ondulatorios. En sus propias palabras: “The eigenfunctions of Schrödinger’s wave equation are just the transformation functions (or the elements [columns] of the transformation matrix previously denoted by S)” (Jammer: 1989, 319).

Y segunda condición, prosiguiendo con la analogía, deberíamos hacer corresponder la matriz hamiltoniana H de (A) con el operador hamiltoniano $\tilde{H}$ de (B). Desgraciadamente, surge el impedimento de que también aparece un sumatorio $\sum$ en (A). Como “integrar” es en la Mecánica Ondulatoria lo análogo a “sumar” en la Mecánica Matricial, Dirac pensó que lo que debería sustituir, en el paso de lo discreto a lo continuo, al primer miembro de (A) habría de ser:

$$\int h(x, y)\psi(y) dy$$

Por consiguiente, ambas mecánicas podrían unificarse si ésta última expresión coincide con el primer miembro de (B), resultando:

$$\tilde{H}\psi(x) = \int h(x, y)\psi(y) dy$$

En suma, la equivalencia entre mecánicas estaría servida si todo operador hamiltoniano pudiera escribirse como un operador integral, es decir, como una integral del estilo de la expuesta. ¡Pero esto no es siquiera posible para un operador tan sencillo como la identidad! En efecto, tomando $\tilde{H}\psi(x) = \psi(x)$ (operador identidad) resultaría que:

$$\psi(x) = \int h(x, y)\psi(y) dy \text{ para toda función de onda } \psi$$

En particular, haciendo $x = 0$ queda:

$$\psi(0) = \int h(0, y)\psi(y) dy \text{ para toda función de onda } \psi$$

Y, como señalaría von Neumann (1949, 17), con elecciones adecuadas de ψ se obtienen las condiciones contradictorias $\int h(0, y) = 1$ y $\int h(0, y) = 0$.

Sin embargo, el físico británico Dirac no se amilanó ante estas dificultades y, para salvarlas, recurrió a la función que desde entonces se conoce como función δ delta de Dirac. Esta función singular está definida por $\delta(y) = 0$ para todo $y \neq 0$ y, paradójicamente, $\int \delta(y) dy = 1$. Suponiendo la existencia matemática de este extraño ente podemos soslayar el absurdo a que conducía la ecuación de arriba, en efecto, tomando $h(0, y) = \delta(y)$, llegamos aplicando su definición a:

$$\psi(0) = \int h(0, y)\psi(y) dy = \int \delta(y)\psi(y) dy = \psi(0) \int \delta(y) dy = \psi(0)$$

Y, mediante cálculos similares, puede demostrarse que todo operador puede representarse como operador integral, porque “una vez se ha aceptado esta ficción [¡la δ que finge Dirac!] es ya posible representar los más diversos operadores diferenciales como operadores integrales” (von Neumann: 1949, 18), y, por ende, ambas mecánicas resultan *forzosamente* equivalentes.

Realmente, Dirac era consciente de que su “función” no era propiamente una función (¿cómo imaginar una función que vale 0 en todos los puntos menos uno y, sorprendentemente, integra 1?), pero, como aduce Bombal (1999, 135), éste es el triste sino de la δ : “para los físicos se trata de una idealización y formalismo útil, que los matemáticos se encargarán de rigorizar; para los matemáticos, es una noción intuitiva, sin realidad matemática, cuyo uso se justifica por las aplicaciones físicas”. De hecho, esta función δ ya había aparecido implícitamente maquillada en ciertos trabajos de Fourier, Kirchhoff e, incluso, del ingeniero eléctrico Heaviside. Pero hubo que esperar hasta 1950 -¡más de 20 años!!- para que las ideas de Dirac fuesen fundamentadas matemáticamente. En 1950 Laurent Schwartz -creador de la Teoría de Distribuciones, teoría matemática que se encarga de estudiar estas funciones singulares o impropias- descubrió el Teorema de los Núcleos (la función $h(x, y)$ se llama núcleo integral) que afirma (aproximadamente) que todo operador puede representarse

como operador integral, y en 1968 publicó la monografía *Application of distributions to the theory of elementary particles in Quantum mechanics* que por fin dio riguroso soporte matemático a la mayoría de geniales ideas de Dirac.

VON NEUMANN: EQUIVALENCIA Y UNIFICACIÓN

El joven prodigio John von Neumann se convirtió en el discípulo más prometedor de Hilbert nada más llegar a Gotinga en 1926. Junto a él, comenzó a explorar cómo axiomatizar la física cuántica a fin de arrojar claridad sobre su estructura matemática, ya que Hilbert había incluido esta delicada tarea en su egregia lista de problemas físico-matemáticos abiertos a fecha de 1900 (Fernández-Rañada: 2003, 662). El tratamiento matemático de la Mecánica Cuántica iba retrasado porque Hilbert había sufrido una anemia perniciosa durante gran parte del año 26 (Mehra & Rechenberg: 1982, 251). No obstante, Hilbert, von Neumann y Nordheim (1928) dieron el primer paso en la buena dirección al comenzar a extender la teoría espectral de Hilbert de acuerdo a las necesidades cuánticas. Este artículo estimularía el posterior trabajo de von Neumann, que acabaría sedimentando en su magistral *Fundamentos matemáticos de la Mecánica Cuántica*, publicado en Berlín en 1932.

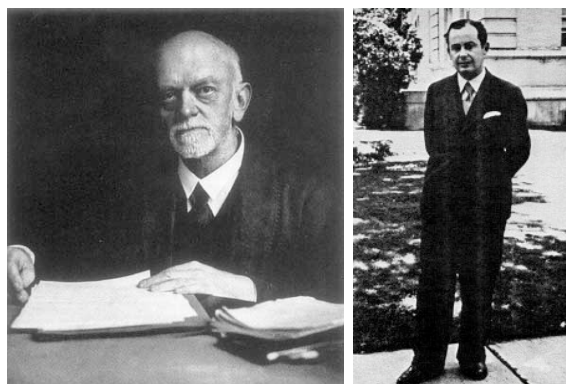


Figura 5. David Hilbert y John von Neumann en el *annus mirabilis* de 1932, cuando von Neumann culminó la resolución del VI Problema de Hilbert en lo concerniente a la Mecánica Cuántica

Von Neumann resolvió el puzzle de la equivalencia matemática entre Mecánicas Cuánticas al mostrar que la Mecánica de Heisenberg -centrada en matrices discretas y sumas- y la Mecánica de Schrödinger -centrada en funciones continuas e integrales- eran matemáticamente equivalentes al no ser más que cálculos de operadores (la estructura de los *observables*) algebraicamente isomorfos sobre topológicamente isomorfos e isométricos espacios de Hilbert (la estructura de los *estados*). En referencia a este cabo suelto, von Neumann subrayó criticando a Schrödinger (1926b):

En el curso de nuestras consideraciones acerca del espacio de Hilbert quedará demostrado este teorema [de isomorfía isométrica entre sus estructuras matemáticas]. Es digno de mención que la mitad del mismo, suficiente para muchos fines y más fácil de demostrar, es la que afirma el isomorfismo entre [la Mecánica Ondulatoria] y una cierta parte de [la Mecánica Matricial]; se la encuentra por primera vez en Hilbert, 1906¹⁸. Así Schrödinger se apoyó sólo en ella para su primitiva demostración de la equivalencia (von Neumann: 1948, n. p. 35; hemos alterado la cita por razones elementales de concordancia).

Coincidiendo con lo que venimos sosteniendo, von Neumann se percató de que Schrödinger sólo había probado que su Mecánica Ondulatoria estaba contenida dentro de la de Heisenberg, pero no recíprocamente. Además, von Neumann puso de relieve reprochándoselo a Dirac:

El método de Dirac, seguido hoy por su claridad y elegancia en gran parte de la literatura relativa a la Mecánica Cuántica, no cumple en modo alguno con las exigencias del rigor matemático [...] Así, por ejemplo, mantiene constantemente la ficción de que todo operador autoadjunto puede reducirse a la forma diagonal [casi equivalentemente, en nuestros términos, la ficción de que todo operador hermítico puede representarse como operador integral], por donde aquellos operadores en los que de hecho ello no es posible hacen indispensables la introducción de funciones “impropias” [¡la δ de Dirac!] que muestran propiedades intrínsecamente contradictorias [...] Tocante a este punto hay que subrayar que la estructuración correcta no consiste, por ejemplo, en una mera puntualización y explicación matemáticas del método de Dirac, sino que se requiere desde un principio una manera de proceder diferente, a saber, el enlace con la teoría espectral de los operadores debida a Hilbert (von Neumann: 1949, 2).

En efecto, von Neumann aplicó la recién horneada teoría matemática del Análisis Funcional a la Mecánica Cuántica. El bautismo oficial del Análisis Funcional con tal nombre acaeció, según Bombal (2003, 106), con la publicación de *Leçons d'Analyse Fonctionnelle* de Levy en 1922. Y el padre fundador de esta disciplina fue, sin duda, el polaco Banach. De cara a comprender el proceder de von Neumann, conviene que retengamos en la memoria las siguientes palabras de Banach acerca de la metodología imperante para el analista funcional, entresacadas de la introducción a su tesis doctoral¹⁹:

¹⁸“Grundzüge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen (IV)”, *Göttingen Nachrichten*, 1906 (157-227).

¹⁹“Sur les Opérations dans les ensembles abstraits et leur applications aux équations intégrales”, *Fundamenta Mathematicae*, 1920 (133-181).

El objetivo de este trabajo es demostrar algunos teoremas que son ciertos para diferentes espacios funcionales. En lugar de probar los resultados para cada espacio funcional particular, he optado por un enfoque diferente: considero en general un conjunto de elementos abstractos, para los que postulo una serie de propiedades y demuestro los teoremas para esos conjuntos. Entonces pruebo que los distintos espacios funcionales particulares en los que estoy interesado, satisfacen los axiomas postulados (Bombal: 2003, 107).

Y es que la manera de trabajar de von Neumann para probar tanto la equivalencia como la unificación entre Mecánicas Cuánticas tomó carta de naturaleza con esta técnica, que no es sino la manera axiomática de trabajar que asociamos con Hilbert: von Neumann consideró una Mecánica Cuántica abstracta, para la que probó ciertos teoremas, que garantizaban que cualesquiera dos instancias de la misma *-verbigracia-* las Mecánicas Matricial y Ondulatoria-eran *a fortiori* isomorfos e isométricos.

El método de Dirac se reducía, en esencia, a la búsqueda de una analogía formal entre el espacio *discreto* de los valores de los índices de las matrices que aparecían en la ecuación (A) y el espacio *continuo* de las variables de las funciones de onda que aparecían en la ecuación (B). Von Neumann los designó, respectivamente, por Z ($= \mathbb{N}$, es decir, los números naturales, sobre los que variaban m y n) y por Ω ($= \mathbb{R}$, es decir, los números reales, sobre los que variaban x e y). Pero, como adujo von Neumann (1949, 20), “no es maravilla que esto [la analogía unificadora perseguida por Dirac!] no se pueda lograr sin cierta violencia sobre el formalismo y la matemática: los espacios Z y Ω son verdaderamente muy distintos, y toda tentativa de ponerlos en relación debe chocar con grandes dificultades”. Von Neumann se percató de que, si bien Z y Ω son muy diferentes, los espacios de funciones definidos sobre ellos son, esencialmente, el mismo. De otro modo: como lo que realmente resulta determinante en Mecánica Cuántica no es Z u Ω , sino el espacio funcional definido sobre Z (los vectores) o sobre Ω (las funciones de onda), pues la analogía que debe establecerse ha de versar sobre estos últimos. Retomando la idea de Dirac de que a las autofunciones de onda corresponden autovectores, von Neumann observó que el espacio de funciones de la Mecánica Matricial -que él denotó por F_Z - debía ser el de los vectores caracterizados por ω -tuplas tales que la suma de su cuadrado es finita²⁰. En consecuencia, esto le sugirió restringirse al espacio de sucesiones de cuadrado sumable:

$$F_Z = \ell^2 = \left\{ (z_n) \mid \|z_n\|_2 = \left(\sum_{n=1}^{\infty} z_n^* z_n \right)^{1/2} < \infty \right\}$$

²⁰ Aunque Wintner todavía comentaba en 1928 que “a complete and mathematically satisfactory treatment of quantum-theoretic matrices continues to be a desideratum” (Jammer: 1989, 228), lo cierto es que poco a poco los físicos cuánticos fueron considerando únicamente esta clase de vectores en los cálculos.

(Históricamente, indica Dieudonné (1981, 111-7), este espacio se le apareció a Hilbert en 1906 al estudiar ciertas ecuaciones integrales que acababan transformándose, mediante introducción de un sistema ortogonal completo de funciones, en sistemas de infinitas ecuaciones lineales con infinitas incógnitas en que tanto los datos como las incógnitas eran sucesiones de números de cuadrado sumable; posteriormente, sería redefinido en 1908 por Schmidt.) Más aún, von Neumann observó que al espacio de las funciones de la Mecánica Ondulatoria -que él denotó por F_Ω - se le exigía siempre que la integral de su cuadrado fuera finita (por su interpretación como densidades de carga o de probabilidad), y esto le sugirió restringirse al espacio de funciones de cuadrado integrable:

$$F_\Omega = L^2 = \{f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C} \mid \|f\|_2 = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)f(x) dx \right)^{1/2} < +\infty\}$$

(Espacio que, como va dicho, apareció de la mano de Riesz y Fischer en 1907.) Y ambos espacios funcionales eran los espacios de los *estados* del sistema en ambas mecánicas. Es de señalar que von Neumann conocía cómo representar los estados en la Mecánica de Schrödinger, mediante funciones de onda, pero dudaba sobre cómo hacer lo mismo en la Mecánica de Heisenberg: “En la primitiva forma de la Mecánica Matricial [...] no se daba este concepto general de estado, del que es un caso particular el de estado estacionario” (von Neumann: 1949, n. p. 18).

Demostrar la equivalencia matemática entre las Mecánicas Matricial y Ondulatoria era, utilizando palabras de von Neumann (1949, 21), probar que “es posible establecer entre F_Z y F_Ω una correspondencia biunívoca [...] de modo que la correspondencia así establecida sea lineal y conserve las longitudes”. A la hora de formalizar este resultado, von Neumann puso en práctica la metodología de Banach. Primero, caracterizó el *espacio de Hilbert*, llamado así en honor a su maestro. Segundo, estudió su geometría y concluyó “que está unívocamente caracterizado por las propiedades que se indican, es decir, que no admite interpretación alguna esencialmente distinta” (1949, 23). Y, tercero, como F_Z era el modelo estándar de espacio de Hilbert y F_Ω también satisfacía sus axiomas, ambos eran esencialmente lo mismo: “ F_Z y F_Ω son isomorfos, o sea, idénticos en su estructura íntima (realizan en dominios matemáticos distintos las mismas propiedades abstractas), y pues ellos (¡y no Z y Ω !) son el auténtico substrato analítico de la teoría de las matrices y de la ondulatoria, respectivamente, esta isomorfía significa que ambas teorías deben dar los mismos resultados” (1949, 22). El núcleo matemático de esta última afirmación se sustentaba en el Teorema de Riesz–Fischer, que asevera que dado un sistema $\{\varphi_k\}$ ortonormal completo:

$$\Phi_{\{\varphi_k\}} : L^2 \longrightarrow \ell^2, \psi \longmapsto (\langle \psi, \varphi_k \rangle)_{k=1}^\infty$$

es un isomorfismo isométrico entre F_Ω y F_Z (von Neumann: 1949, 41). Ernst Fischer y Friedrich Riesz, a la sazón profesor de Enseñanza Media en una

pequeña ciudad húngara, lo descubrieron simultánea e independientemente en 1907, esto es, veinticinco años antes de que von Neumann lo aplicase en la fundamentación matemática de la Mecánica Cuántica, apoyándose en la recién construida integral de Lebesgue. De esta manera, en virtud del isomorfismo isométrico Φ , von Neumann logró salvar la equivalencia matemática entre la Mecánica Matricial y la Mecánica Ondulatoria: la isometría entre los espacios de estados (vectores/funciones de onda) y la isomorfía entre los espacios de observables (matrices/operadores ondulatorios) construidos sobre aquéllos, y que ya intuyera Schrödinger con su monomorfismo algebraico Θ^{21} .



Figura 6. Congreso Solvay de 1927: Olimpo de los físicos cuánticos. En primera fila (sentados), Planck y Einstein aparecen como segundo y quinto, respectivamente, contando por la izquierda. En segunda fila, Bohr y Born aparecen como primero y segundo contando por la derecha. Y, en tercera fila (en pie), Heisenberg y Schrödinger están en tercero y sexto lugar empezando a contar por la derecha

Por último, tras la equivalencia, von Neumann (1949, 23) también resolvió la cuestión de la unificación:

Porque los sistemas F_Z y F_Ω son isomorfos, y matemáticamente equivalentes las teorías de la Mecánica Cuántica edificadas sobre ellos, es de esperar que se logrará una estructura unitaria, independiente de lo accidental que resulta del marco formal en cada caso elegido, y que presente los rasgos positivamente esenciales de la Mecánica Cuántica, cuando se busquen las propiedades intrínsecas, comunes a F_Z y F_Ω , de los conjuntos de funciones y se las elija, una vez halladas, como punto de partida.

²¹ Si los operadores ondulatorios $\tilde{P}$ y $\tilde{Q}$ verifican sobre su dominio común en L^2 que $\tilde{P}\tilde{Q} - \tilde{Q}\tilde{P} = \frac{\hbar}{2\pi i} \tilde{I}$, igual relación verifican en ℓ^2 los operadores matriciales correspondientes por el isomorfismo de von Neumann (Dieudonné: 1981, 173).

La gran meta del magisterio de von Neumann fue, precisamente, alcanzar esta unificación canónica largo tiempo buscada y no encontrada (Schrödinger, Eckart, Jordan, Dirac...).

CONCLUSIÓN

Tras la unificación de las Mecánicas Matricial y Ondulatoria en la Mecánica Cuántica abstracta concebida por von Neumann, los problemas de fundamentación matemática se disiparon. Las primitivas mecánicas han pervivido como reminiscencias en los tratados mecánico-cuánticos posteriores, como “imágenes” a la Dirac de la Mecánica Cuántica de von Neumann. Sin embargo, los problemas de interpretación de este formalismo aún siguen vigentes. Con el paso del tiempo, los manuales han ido optando por un formalismo más cercano a lo que fue el de la Mecánica Ondulatoria y, antagónicamente, una interpretación más apegada a la de la Mecánica Matricial. Dicho en corto, se aprecia que se emplean más las funciones de onda de Schrödinger que las matrices de Heisenberg, pero a cambio aquéllas se interpretan en el sentido de éste. En efecto, el *principio de indeterminación* de Heisenberg, el *principio de complementariedad* de Bohr y la interpretación estadística de la función de onda de Born, junto al postulado de proyección de von Neumann, acabaron por sedimentar en la conocida Interpretación de Copenhague, que tanto molestara a Einstein y que aún permanece en pie tras los experimentos de Aspect²².

Las páginas que anteceden han pretendido mostrar, desde la perspectiva de una historia “interna” de las matemáticas de la física cuántica, cómo este caso de estudio ofrece mayor riqueza en vértices y aristas de la que muchos físicos, filósofos e historiadores de la física han percibido. Resumiendo, la meta que páginas atrás se trazaba este artículo, y que espera haber alcanzado, no ha sido sino la de enriquecer nuestra visión de la evolución histórica de los modelos matemáticos de la Mecánica Cuántica.

APÉNDICE

Sea $\tilde{F} : L^2 \longrightarrow L^2$ un operador hermítico y $F = \Theta_{\{\varphi_k\}}(\tilde{F})$ la matriz correspondiente en el morfismo. Para cada función φ_j del sistema $\{\varphi_k\}$ ortogonal completo en L^2 (por comodidad y sin pérdida de generalidad, lo tomamos como ortonormal), se da necesariamente $\tilde{F}(\varphi_j) \in L^2$. En consecuencia, la columna j -ésima de la matriz F es de cuadrado sumable, en otras palabras, pertenece a ℓ^2 ; en efecto:

²²Cf. Madrid Casado (2005) para un análisis del realismo einsteiniano y Rivadulla (2004) o Madrid Casado (2004) para su relación con EPR.

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{\infty} F_{ij}^* F_{ij} &= \sum_i |F_{ij}|^2 = \sum_i \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_i^*(x) \tilde{F}(\varphi_j)(x) dx \right|^2 = \\
&= \sum_i \left\langle \varphi_i, \tilde{F}(\varphi_j) \right\rangle^2 = \sum_i \left\langle \tilde{F}(\varphi_j), \varphi_i \right\rangle^2 = \\
&= \|\tilde{F}(\varphi_j)\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{F}^*(\varphi_j) \tilde{F}(\varphi_j)(x) dx < +\infty
\end{aligned}$$

Además, como $\tilde{F}$ es hermítico y $\Theta_{\{\varphi_k\}}$ conserva la hermiticidad, F es hermítica, en cuyo caso, si las columnas son de cuadrado sumable, las filas también lo son. Por tanto, para cada operador $\tilde{F}$, la matriz F es de Wintner (i. e. filas y columnas de F_{mn} pertenecen a ℓ^2).

REFERENCIAS

- [1] N. I. AKHIEZER, *The classical moment problem*, Oliver & Boyd, Edimburgo y Londres, 1965.
- [2] M. BELLER, “Matrix Theory before Schrödinger”, *Isis* **74** (1983) 4, 469–491.
- [3] D. BOHM, *Quantum Theory*, Dover, Nueva York, 1989.
- [4] N. BOHR, *Física Atómica y Conocimiento Humano*, Aguilar, Madrid, 1964.
- [5] F. BOMBAL, “Los modelos matemáticos de la Mecánica Cuántica”, en *La Ciencia en el siglo XX. Seminario “Orotava” de Historia de la Ciencia*, Consejería de Educación del Gobierno de Canarias, Islas Canarias, 1999, 115–146.
- [6] —, “Análisis Funcional: Una perspectiva histórica”, *Proceedings of the Seminar of Mathematical Analysis 2002-2003*, Secretariado de Publicaciones de la Universidad de Sevilla, 2003, 81–117.
- [7] M. BORN & P. JORDAN, “Zur Quantenmechanik”, *Z. Physik* **34** (1925), 858–888; reimpreso en van der Waerden (ed.) (1968, 277–306).
- [8] M. BORN, W. HEISENBERG & P. JORDAN, “Zur Quantenmechanik II”, *Z. Physik* **35** (1926), 557–615; reimpreso en van der Waerden (ed.) (1968, 321–386).
- [9] S. C. COUTINHO, “The Many Avatars of a Simple Algebra”, *The American Mathematical Monthly* **104** (1997) 7, 593–604.
- [10] J. DIEUDONNÉ, *History of Functional Analysis*, North-Holland, Amsterdam, 1981.
- [11] P. A. M. DIRAC, “The Fundamental Equations of Quantum Mechanics”, *Proc. Roy. Soc.* **109** (1925), 642–653; reimpreso en van der Waerden (ed.) (1968, 307–320).

- [12] —, *The Principles of Quantum Mechanics*, Clarendon Press, Oxford, 1947.
- [13] C. ECKART, “Operator Calculus and the Solution of the Equation of Quantum Dynamics”, *Physical Review* **28** (1926), 711–726.
- [14] A. FERNÁNDEZ-RAÑADA, *Ciencia, incertidumbre y conciencia. Heisenberg*, Editorial Nivola, Madrid, 2004.
- [15] M. FERNÁNDEZ-RAÑADA, “David Hilbert, Herman Minkowski, la Axiomatización de la Física y el Problema número seis”, *LA GACETA DE LA RSME* **6** (2003) 3, 641–664.
- [16] W. HEISENBERG, “Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen”, *Z. Physik* **33** (1925), 879–893; reimpreso en van der Waerden (ed.) (1968, 261–276).
- [17] —, *Diálogos sobre Física Atómica*, B.A.C., Madrid, 1972.
- [18] D. HILBERT, L. NORDHEIM & J. VON NEUMANN, “Über die Grundlagen der Quantenmechanik”, *Mathematische Annalen* **98** (1928), 1–30.
- [19] M. JAMMER, *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*, Tomash Publishers, American Institute of Physics, 1989.
- [20] P. JORDAN & J. VON NEUMANN, “On inner products in linear metric spaces”, *Ann. of Math.* **36** (1935), 719–723.
- [21] C. M. MADRID CASADO, “De EPR”, *El Catoblepas* **29** (2004), 17–25.
- [22] — “A vueltas con Ortega, la física y Einstein”, *Revista de Occidente* **294** (2005), 5–20.
- [23] J. MEHRA & H. RECHENBERG, *The Historical Development of Quantum Theory*, IV, Springer Verlag, Nueva York, 1982.
- [24] F. A. MULLER, “The Equivalence Myth of Quantum Mechanics - Part I”, *Stud. Hist. Phil. Mod. Phys.*, 28/1, 35–61.
- [25] —, “The Equivalence Myth of Quantum Mechanics - Part II”, *Stud. Hist. Phil. Mod. Phys.* **28** (1997b) 2, 219–247.
- [26] W. PAULI, “Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik”, *Z. Physik* **36** (1926), 336–363; reimpreso en van der Waerden (ed.) (1968, 387–415).
- [27] A. RIOJA, “Los Orígenes del Principio de Indeterminación”, *Theoria* **X** (1995) 22, 117–143.
- [28] A. RIVADULLA, *Éxito, razón y cambio en física. Un enfoque instrumental en teoría de la ciencia*, Editorial Trotta, Madrid, 2004.
- [29] J. M. SÁNCHEZ RON, *Historia de la física cuántica I. El periodo fundacional (1860-1926)*, Crítica, Barcelona, 2001.
- [30] E. SCHRÖDINGER, “Quantisierung als Eigenwertproblem (I)”, *Annalen der Physik* **79** (1929a), 361–376; reimpreso en Schrödinger (1982, 1–12).

- [31] —, “Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen”, *Annalen der Physik* **79** (1926b), 734–756; reimpreso en Schrödinger (1982, 45–61).
- [32] — *Collected Papers on Wave Mechanics*, Chelsea Publishing Company, Nueva York, 1982.
- [33] J. A. SHOHAT & J. D. TAMARKIN, *The problem of moments*, American Mathematical Society, Nueva York, 1943.
- [34] B. L. VAN DER WAERDEN (ED.), *Sources of Quantum Mechanics*, Dover, Nueva York, 1968.
- [35] J. VON NEUMANN, *Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica*, Publicaciones del Instituto de Matemáticas Jorge Juan, Madrid, 1949.

AGRADECIMIENTOS

Quisiera mencionar expresamente a Jaime J. Sánchez Gabites (Dpto. Geometría y Topología, Universidad Complutense), cuya conversación tanto ha enriquecido este artículo, así como a mi director Andrés Rivadulla (Dpto. Lógica y Filosofía de la Ciencia, Universidad Complutense), espectador en primera fila de estos meses de trabajo.

Carlos M. Madrid Casado
Departamento de Lógica y Filosofía de la Ciencia
Universidad Complutense de Madrid
Correo Electrónico: carlosmadrid.tn@yahoo.es