Los grupos simplécticos y su representación en la teoría del producto cuántico. I. Sp$(2, \mathbb{R})$

Joseph C. Várilly y José M. Gracia-Bondía

Escuela de Matemática, Universidad de Costa Rica, San José 11501, Costa Rica

Cienc. Tec. (CR) **11** (1987), 63–81

Resumen

El álgebra de observables de la teoría cuántica encierra una representación del grupo simpléctico. Esta puede usarse a su vez para resolver problemas de caracterización de estados y síntesis espectral en la formulación de la Mecánica Cuántica en el espacio de las fases.

Abstract

The algebra of observables of quantum theory carries a representation of the symplectic group. This representation may be used to characterize states and for spectral synthesis in the phase-space formulation of Quantum Mechanics.

Introducción

El objetivo fundamental de este artículo es dar a conocer una representación de los grupos simplécticos que aparece naturalmente en teoría cuántica cuando esta se formula en la arena del espacio de las fases.

La idea básica es: el álgebra de observables cuánticos sobre $\mathbb{R}^{2n}$ es equivariante por la acción simpléctica, por lo cual uno conjetura que esta última debe realizarse por automorfismos del álgebra, con el producto cuántico reflejando la multiplicación del grupo simpléctico correspondiente. Así es en efecto y además, el carácter cuasiclásico de la acción facilita el cálculo de las funciones o distribuciones temperadas que ejecutan dichos automorfismos.

Con objeto de no oscurecer el espíritu de los temas fundamentales con complicaciones que desde cierto punto de vista son inesenciales, el propósito del artículo se lleva a cabo únicamente para el caso $n = 1$. Sin embargo, el lector comprobará que en muchas ocasiones, cuando la prueba es básicamente la misma, desarrollamos nuestros resultados de modo que son válidos independientemente de la dimensión del espacio de las fases. Nos proponemos colectar los análogos faltantes de todos nuestros resultados en el caso general en un próximo artículo.

El plan es el siguiente: en la sección 1 se repasa la teoría de los grupos simplécticos sobre $\mathbb{R}^{2n}$ con fines más que nada pedagógicos; tomados conjuntamente, el apéndice Apéndice A y la sección 1 constituyen una introducción elemental al tópico; aunque se incluyen resultados como el Teorema 1 generalmente omitidos en tratamientos equivalentes. En la sección 2 se introduce el álgebra cuántica de Moyal $\mathcal{M}$ y la representación del grupo simpléctico en ella. Especial relieve adquieren las propiedades de equivariancia de la función generatriz de Poincaré. La representación es en realidad proyectiva; el análisis del grupo de factores asociado queda para un siguiente artículo. La sección 3 es un inciso de carácter Lie-algebraico sobre la transformada de Cayley, que ha emergido en las fórmulas de la sección 2; la misma subyace a nuestra excursión en la teoría de funciones especiales en la sección 6. En la sección 4 se prueba la ley de grupo y se atan algunos de los cabos sueltos.

Las herramientas forjadas hasta ese momento permiten abordar importantes cuestiones en la teoría de los estados cuánticos en la sección 5. En la sección 6 se analiza en forma parcial la teoría espectral, pasando rápidamente a un ensayo sobre la inversión de los cálculos funcionales cuánticos. La mayor parte de lo que es nuevo en el artículo se halla en las secciones 5 y 6. Finalmente, en la sección 7 se extiende la representación al grupo producto semidirecto $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R}) \rtimes \mathbb{H}_3$.

1. Los grupos simplécticos

Introducimos los grupos simplécticos directamente como grupos de matrices reales (la relación con la teoría de formas bilineales alternadas se examina en el Apéndice Apéndice A). Sea la matriz $2n \times 2n$ fundamental:

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1_n \\ -1_n & 0 \end{pmatrix}, \tag{1}$$

donde 1_n denota la matriz identidad $n \times n$. Es inmediato verificar que $J^t = J^{-1} = -J$ y que $\det J = 1$. La matriz cuadrada M se dice *simpléctica* si

$$M^t J M = J. \tag{2}$$

Por definición, las matrices simplécticas tienen dimensión par. Se ve inmediatamente que forman un grupo. En particular, la inversa de una matriz simpléctica está dada por:

$$M^{-1} = -JM^tJ. \tag{3}$$

Denotamos por $\mathrm{Sp}(2n,\mathbb{R})$ el grupo de matrices simplécticas reales $2n \times 2n$.

Proposición 1. *Para $n = 1$ se tiene $\mathrm{Sp}(2,\mathbb{R}) = \mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$, el grupo de matrices reales con determinante unidad.*

Demostración. Fíjese que $\begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & ad-bc \\ bc-ad & 0 \end{pmatrix}$. □

$\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ es un grupo de Lie conexo, infinitamente conexo, semisimple, no compacto. Estos hechos no son obvios y se demostrarán en lo que sigue.

Proposición 2. $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ *es isomorfo al grupo* $\mathrm{SU}(1,1)$ *de matrices pseudounitarias de determinante unidad, que satisfacen $W^* I_{1,1} W = I_{1,1}$, donde*

$$I_{1,1} := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

y W^* denota la matriz adjunta de W.

Demostración. La matriz de SU$(1,1)$ más general tiene la forma:

$$W = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad |\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1.$$

Calculamos:

$$\begin{pmatrix} \bar{\alpha} & \bar{\gamma} \\ \bar{\beta} & \bar{\delta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 - |\gamma|^2 & \bar{\alpha}\beta - \bar{\gamma}\delta \\ \alpha\bar{\beta} - \gamma\bar{\delta} & |\beta|^2 - |\delta|^2 \end{pmatrix}.$$

Sustituimos la relación $\bar{\alpha}\beta - \bar{\gamma}\delta = 0$ que viene de la ecuación de arriba en $\alpha\delta - \gamma\beta = 1$, obteniendo $\alpha\delta - (|\gamma|^2\delta/\bar{\alpha}) = 1$. Usando $|\gamma|^2 = |\alpha|^2 - 1$ concluimos $\delta = \bar{\alpha}$, de donde la misma relación antes invocada permite inferir $\gamma = \bar{\beta}$. □

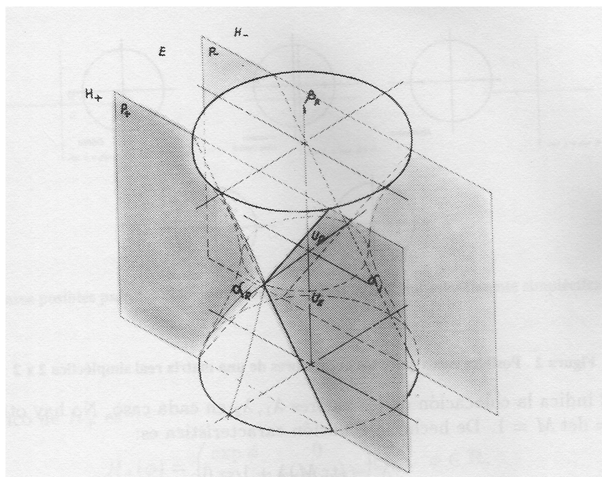

Figura 1: Región exterior a un hiperboloide

Los elementos de SU$(1,1)$ y de SL$(2,\mathbb{R})$ están relacionados por un automorfismo externo dado por la matriz $U \in U(2)$:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix}.$$

Explícitamente, si $M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ y $W = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix}$:

$$M = UWU^{-1} = \begin{pmatrix} \operatorname{Re}(\alpha+\beta) & -\operatorname{Im}(\alpha-\beta) \\ \operatorname{Im}(\alpha+\beta) & \operatorname{Re}(\alpha-\beta) \end{pmatrix};$$

$$W = U^{-1}MU = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a+d-i(b-c) & a-d+i(b+c) \\ a-d-i(b+c) & a+d+i(b-c) \end{pmatrix}.$$

Nótese que $U^{-1}JU = -i\, I_{1,1}$. En términos de los parámetros de SU$(1,1)$, la conectividad de SL$(2,\mathbb{R})$ se examina muy fácilmente. Sean $\alpha = \alpha_R + i\alpha_I$, $\beta = \beta_R + i\beta_I$. La condición de unimodularidad da:

$$\alpha_R^2 + \alpha_I^2 - \beta_R^2 = 1 + \beta_I^2 \geqslant 1.$$

Para β_I fijo esta ecuación describe un hiperboloide de revolución de una hoja con cintura circular en el plano (α_R, α_I). Según β_I va variando sobre $\mathbb{R}$, se rellena (dos veces) la región del espacio $\mathbb{R}^3$ limitada por el hiperboloide $\beta_I = 0$ (véase la Figura 1).

Es claro que topológicamente $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R}) \approx \mathbb{S}^1 \times \mathbb{R}^2$ y por tanto el grupo $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ es no compacto, conexo e infinitamente conexo. Incidentalmente, la conectividad del grupo permite asegurar que $\det M = 1$ si $M \in \mathrm{Sp}(2,\mathbb{R})$; la ecuación definitoria (2) no daba más que $\det M = \pm 1$.

Resulta útil ubicar los principales tipos de matrices simplécticas 2×2 sobre la Figura 1. La matriz unidad, identidad del grupo, corresponde al punto $\alpha_R = I$, $\alpha_I = \beta_R = 0$. Podemos clasificar las matrices de $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ en

(a) *Elípticas* (E): matrices con valores propios mutuamente complejos conjugados, de módulo unidad, incluyendo $M = 1$ o $M = -1$.

(b) *Hiperbólicas* (H_+, H_-): con valores propios diferentes reales e inversos.

(c) *Parabólicas* (P_+, P_-): con valores propios $+1$ (doble) ó -1 (doble) y no semisimples.

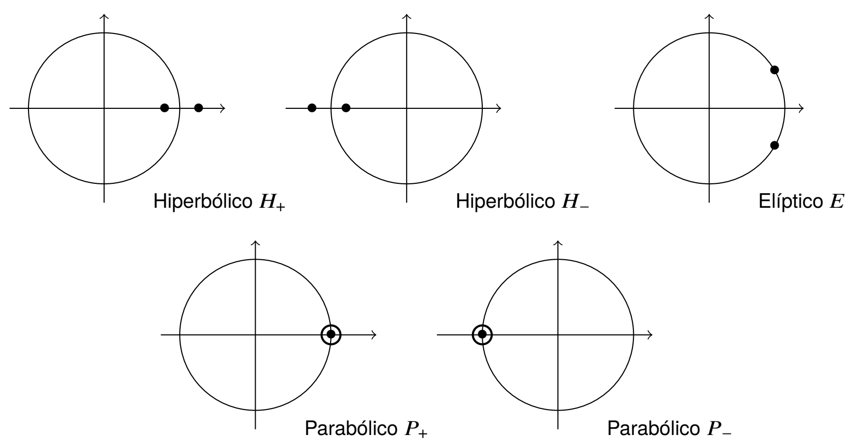

Figura 2: Posibles casos para los autovalores de una matriz real simpléctica 2×2

La Figura 2 indica la colocación de los valores λ_1, λ_2 en cada caso. No hay otras posibilidades porque $\lambda_1\lambda_2 = \det M = 1$. De hecho, la ecuación característica es

$$\lambda^2 - (\operatorname{tr} M)\lambda + 1 = 0.$$

En resumen, se clasifican los elementos de $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ como sigue.

Proposición 3. (a) *$M \in E$ si y solo si $|\operatorname{tr} M| < 2$ ó $|\operatorname{tr} M| = 2$ con M semisimple.*

(b) *$M \in H_+$ si y solo si $\operatorname{tr} M > 2$.*

(c) *$M \in H_-$ si y solo si $\operatorname{tr} M < -2$.*

(d) *$M \in P_+$ si y solo si $\operatorname{tr} M = 2$ y $M \neq 1$.*

(e) *$M \in P_-$ si y solo si $\operatorname{tr} M = -2$ y $M \neq -1$.* ⊟

Estos conjuntos se visualizan fácilmente en la Figura 1, tomando en cuenta $\operatorname{tr} M = 2\alpha_R$.

Una parte de las matrices de $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ se encuentran sobre grupos uniparamétricos. Para estudiar estos necesitamos introducir el álgebra de Lie $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{R})$ asociada a $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$. De (2) deducimos para los generadores L de matrices simplécticas: $L^t J + JL = 0$ si y solo si e^L es simpléctica.

Dicho de otro modo:

$$L = JB, \quad \text{con} \quad B^t = B. \tag{4}$$

Proposición 4. *Para cualquier matriz de $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{R})$, si λ es un autovalor, $-\lambda$ también lo es. El autovalor 0 siempre ocurre con multiplicidad par.*

Demostración. La ecuación característica es $\lambda^2 + \det L = 0$. □

De acuerdo con la proposición, la Figura 3 ilustra los tipos de elementos de $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{R})$.

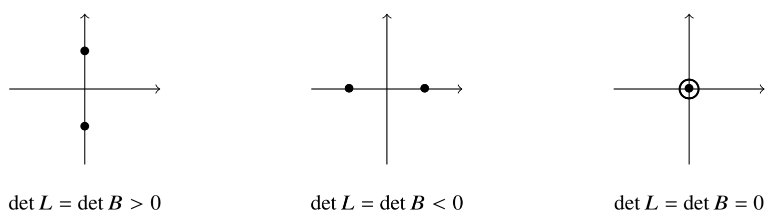

Figura 3: Casos posibles para los autovalores de una matriz real infinitesimalmente simpléctica 2×2

Por exponenciación las matrices del primer tipo dan todas las matrices de H_+; las del segundo todas las de E; las del tercero no triviales todas las de P_+.

Un elemento típico de E es

$$E(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\operatorname{sen}\phi \\ \operatorname{sen}\phi & \cos\phi \end{pmatrix}, \qquad \phi \in \mathbb{R} \text{ mód } 2\pi.$$

Un elemento típico de H_+ es

$$H_+(\phi) = \begin{pmatrix} e^{\phi} & 0 \\ 0 & e^{-\phi} \end{pmatrix}, \qquad \phi \in \mathbb{R}.$$

Un elemento típico de H_- es

$$H_-(\phi) = \begin{pmatrix} -e^{\phi} & 0 \\ 0 & -e^{-\phi} \end{pmatrix}, \qquad \phi \in \mathbb{R}.$$

Un elemento típico de P_+ es

$$P_+(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & \phi \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \phi \in \mathbb{R}.$$

Un elemento típico de P_- es

$$P_-(\phi) = \begin{pmatrix} -1 & \phi \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \phi \in \mathbb{R}.$$

Los elementos indicados de E, H_+, P_+ describen subgrupos uniparamétricos al tomar ϕ todos los valores indicados.

Proposición 5. *Todo elemento de* $\mathrm{Sp}(2,\mathbb{R})$ *es equivalente por semejanza a alguno de los arriba indicados.*

Demostración. Hay tres casos que considerar.

(i) Sea M elíptica. Si $M = 1$ o $M = -1$ no hay nada que probar. Sean $e^{i\phi}$, $e^{-i\phi}$ los autovalores de M y sean v, $\bar{v}$ los autovectores correspondientes. Si A es la matriz de columnas $\frac{v+\bar{v}}{2}$, $\frac{v-\bar{v}}{2i}$, entonces $A^{-1}MA = E(\phi)$. Es claro que puede tomarse $A \in \mathrm{Sp}(2,\mathbb{R})$.

(ii) Sea M hiperbólica. Sean $\pm e^{\phi}$, $\pm e^{-\phi}$ los autovalores de M y sean v_1, v_2 los autovectores correspondientes. Si A es la matriz de columnas v_1, v_2, entonces $A^{-1}MA = H_{\pm}(\phi)$. Es claro que puede tomarse $A \in \mathrm{Sp}(2,\mathbb{R})$.

(iii) Sea M parabólica y sea v_1 un autovector de M correspondiente al autovalor ± 1. Sea v_2 tal que $(M \mp 1)v_2 = \phi v_1$; sea A la matriz con columnas v_1, v_2. Se tiene $A^{-1}MA = P_{\pm}(\phi)$. Es claro que puede tomarse $A \in \mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$. Además, conjugando $P_{\pm}(\phi)$ con un elemento diagonal de $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ uno obtiene $P_{\pm}(\phi')$ para cualquier ϕ' del mismo signo que ϕ. □

Desde el punto de vista del presente artículo, una clasificación importante de matrices de $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ es la siguiente.

(a) $C_+ : \det(M+1) > 0$: elementos exponenciales $\neq -1$.

(b) $C_0 : \det(M+1) = 0$: elementos “excepcionales”.

(c) $C_- : \det(M+1) < 0$: elementos ni exponenciales ni excepcionales.

Se tiene $C_+ = (E \setminus \{-1\}) \cup H_+ \cup P_+$, $C_0 = P_- \cup \{-1\}$, $C_- = H_-$.

El conjunto C_0 es el mayor abierto conexo, simplemente conexo y estrellado, formado por elementos exponenciales.

Aunque, según lo anterior, no todo elemento de $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ es exponencial, se verifica lo siguiente.

Teorema 1. *Todo elemento de* $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ *puede descomponerse en producto de dos elementos exponenciales.*

Demostración. De hecho esta proposición es válida para todos los grupos simplécticos, por lo que desarrollaremos el argumento independientemente de la dimensión del grupo. El punto de partida es la descomposición polar ordinaria: como cualquier matriz no singular real, $M \in \mathrm{Sp}(2n,\mathbb{R})$ puede escribirse como

$$M = PO, \tag{5}$$

donde P es definida positiva y O es ortogonal. De (2) o (3) obtenemos $M = -JM^{-t}J$. Esto insertado en (5) da:

$$PO = (-JP^{-1}J)(-JOJ),$$

donde obviamente $-JP^{-1}J$ y $-JOJ$ son, respectivamente, definida positiva y ortogonal. Por la unicidad de la descomposición polar, deducimos

$$P = -JP^{-1}J, \tag{6a}$$

$$O = -JOJ. \tag{6b}$$

Esto dice que P y O son simplécticas también. En consecuencia $\det O = 1$ y se puede escribir $O = \exp A$ con $A^t = -A$. Como A debe ser única, de (6b) deducimos además $AJ = JA$. Es claro que $A \in \mathfrak{sp}(2n, \mathbb{R})$. En conclusión, se ha probado que $O = \exp(JB_c)$, donde B_c es simétrica y conmuta con J. De otro lado, se puede también poner $P = \exp C$ con $C^t = C$. Usando (6a) obtenemos $CJ + JC = 0$ y de nuevo se ve que $C \in \mathfrak{sp}(2n, \mathbb{R})$. En conclusión, $P = \exp(JB_a)$ donde B_a es simétrica y anticonmuta con J. □

En general, toda matriz simétrica puede descomponerse en dos sumandos que anticonmutan y conmutan respectivamente con J:

$$B = B_a + B_c = \frac{B + JBJ}{2} + \frac{B - JBJ}{2}\,.$$

Esto sugiere una descomposición canónica de $\mathfrak{sp}(2n, \mathbb{R})$. Retornando al caso $n = 1$, la matriz simétrica más general es de la forma

$$B = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}.$$

Es fácil entonces ver que la condición $BJ = JB$ da $B = x\,1$, esto es, $L = xJ$. Análogamente se calcula que $BJ = -JB$ da, en general:

$$L = y\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + z\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Denotemos $L_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$, $L_2 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $L_3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

Evaluando

$$M = \exp(yL_2 + zL_3)\exp(xL_1),$$

obtenemos una parametrización completa del grupo simpléctico:

$$M = \begin{pmatrix} \cosh r + \frac{z}{r}\operatorname{senh} r & \frac{y}{r}\operatorname{senh} r \\ \frac{y}{r}\operatorname{senh} r & \cosh r - \frac{z}{r}\operatorname{senh} r \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos x & \operatorname{sen} x \\ -\operatorname{sen} x & \cos x \end{pmatrix},$$

donde hemos escrito $r := \sqrt{y^2 + z^2}$.

A valores reales diferentes de y, z les corresponden matrices diferentes y se ve con toda claridad que la topología de $\mathrm{SL}(2, \mathbb{R})$ es la de $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{S}^1$.

Otras descomposiciones, distintas a la referida en el Teorema 1 y útiles a diferentes efectos, son posibles. Remitimos a [1, 2] para unos ejemplos.

2. El álgebra del producto cuántico

El *producto cuántico* o *producto torcido* de dos funciones complejas de la clase $\mathcal{S}$ de Schwartz (indefinidamente derivables, rápidamente decrecientes en el infinito) definidas sobre $\mathbb{R}^{2n}$ está dado por

$$f \times g(u) := \iint f(v)g(w)\exp[i(uJv + vJw + wJu)]\,\underline{dv}\,\underline{dw}. \tag{7}$$

En lo que sigue usaremos con frecuencia las medidas de Haar sobre $\mathbb{R}^k$: $\underline{du} := (2\pi)^{-k/2}\,d^k u$, donde $d^k u$ denota la medida de Lebesgue ordinaria.

Se puede verificar fácilmente que $\mathcal{S} \times \mathcal{S} \subset \mathcal{S}$ (de hecho, es $\mathcal{S} \times \mathcal{S} = \mathcal{S}$) y que la operación es continua en $\mathcal{S}$. Estas observaciones, junto con la propiedad:

$$\int f \times g(u)\, \underline{du} = \int f(u)\, g(u)\, \underline{du}$$

permiten definir el producto torcido de una distribución temperada y una función de $\mathcal{S}$. Sea $\mathcal{M}$ la clase de distribuciones temperadas T tales que $T \times f$ y $f \times T$ pertenecen a $\mathcal{S}$ cualquiera que sea f en la clase de Schwartz. Es casi inmediato comprobar que puede dársele a $\mathcal{M}$ una estructura de álgebra asociativa con el producto torcido, con la conjugación compleja como involución y la función constante 1 como elemento unidad.

Tienen gran importancia física los automorfismos internos de $\mathcal{M}$, dados por expresiones del tipo

$$f \mapsto \Xi \times f \times \Xi^*, \tag{8}$$

donde Ξ es "unitaria", esto es, $\Xi \times \Xi^* = \Xi^* \times \Xi = 1$. Ahora bien, es patente que (7) es invariante bajo el grupo simpléctico:

$$(f \times g)^M(u) = (f^M \times g^M)(u),$$

donde

$$f^M(u) := f(M^{-1}u), \quad \text{para} \quad M \in \mathrm{Sp}(2n, \mathbb{R}).$$

Por tanto, es plausible que exista una realización de $\mathrm{Sp}(2n, \mathbb{R})$ por automorfismos de $\mathcal{M}$. Efectivamente se pueden hallar elementos Ξ_M de $\mathcal{M}$ tales que

$$\Xi_M \times f \times \Xi_M^* = f^M \quad \text{para todo} \quad M \in \mathrm{Sp}(2n, \mathbb{R}). \tag{9}$$

Comenzamos por investigar por métodos Lie-algebraicos la correspondencia definida tentativamente por (9) para matrices de C_+. Esto es, estudiamos grupos uniparamétricos de elementos unitarios. El álgebra de Lie $\mathfrak{sp}(2, \mathbb{R})$ se identifica al álgebra de Lie de polinomios de grado dos en las variables q, p ("hamiltonianos cuadráticos") por:

$$L \sim (x, y, z) \mapsto \tfrac{1}{2}\big[(x - y)q^2 + 2zqp + (x + y)p^2\big].$$

Sea H un hamiltoniano cuadrático. La *función de evolución* ${}_H\Xi$ generada por H se define como un exponencial cuántico – más precisamente, como la solución de la ecuación de Schrödinger:

$$2i\,\frac{\partial}{\partial t}\,{}_H\Xi(u;t) = H \times {}_H\Xi(u;t), \quad {}_H\Xi(u;0) = 1; \qquad u \in \mathbb{R}^{2n},\ t \in \mathbb{R}. \tag{10}$$

De (10) puede calcularse [3]:

$${}_H\Xi \times f \times {}_H\Xi^*(u;t) = f^{M(t)}(u),$$

donde $M(t) = \exp(tL_H)$, siendo L_H el elemento de $\mathfrak{sp}(2, \mathbb{R})$ correspondiente al hamiltoniano H – esto es, según (4): si $H = \frac{1}{2}u^t Bu$, entonces $L_H = JB$.

El problema de integrar (10) cuando H es cuadrático ha sido completamente tratado en [3]. De ahí citamos los resultados.

Teorema 2. *Sea $g_H(u;t)$ la función generatriz de Poincaré de la mecánica clásica, definida como la solución de la ecuación de Hamilton–Jacobi modificada:*

$$\frac{\partial g_H}{\partial t} = H\Big(u + \tfrac{1}{2}J\,\frac{\partial g_H}{\partial u}\Big); \quad g_H(u;0) = 0.$$

Las ecuaciones clásicas del movimiento están resueltas en forma paramétrica por:

$$z_0 = u - \tfrac{1}{2}J\frac{\partial}{\partial u}\,g_H(u;t), \quad z(t) = u + \tfrac{1}{2}J\frac{\partial}{\partial u}\,g_H(u;t), \quad \textit{con} \quad z_0 = z(0).$$

Se tiene:

$$_H\Xi(u;t) = \frac{2^n}{\sqrt{\det(1+M(t))}}\exp\big(-\tfrac{i}{2}g_H(u;t)\big), \tag{11}$$

donde:

$$g_H(u;t) = u^tG(t)u, \quad G(t) = J(1-M(t))(1+M(t))^{-1}. \qquad \boxminus$$

En la expresión anterior, u^t y u denotan el vector fila y el vector columna asociados respectivamente al punto del espacio de las fases también designado por u. Se comprueba que $G(t)$ es una matriz simétrica.

Resulta que g_H tiene propiedades de invariancia simpléctica muy notables que permiten dar una forma completamente explícita a los resultados anteriores. Las diferencias entre los diversos tipos de elementos de C_+ clasificados en la sección 1 resaltarán en lo que sigue.

Sea S un cambio de coordenadas lineal canónico $\tilde{u} = Su$ (con S simpléctica). Sea $\widetilde{H}(\tilde{u})$ la nueva expresión del hamiltoniano.

Proposición 6. *Se tiene $g_{\widetilde{H}}(\tilde{u}) = g_H(Su)$.*

Demostración. Si $H = \frac{1}{2}u^tBu$, será $\widetilde{M} = e^{J\widetilde{B}} = e^{JS^tBS} = S^{-1}MS$. Ahora tenemos

$$\begin{aligned} S^{-t}\widetilde{G}S^{-1} &= S^{-t}J(1+\widetilde{M})^{-1}(1-\widetilde{M})S^{-1} \\ &= JS(1+S^{-1}MS)^{-1}S^{-1}(1-M) = J(I+M)^{-1}(I-M). \end{aligned} \qquad \square$$

¡Esto significa que las clases de hamiltonianos invariantes por conjugación van a tener el mismo comportamiento por lo que se refiere a la forma funcional de g_H y $_H\Xi$! Es entonces suficiente llevar a cabo el cálculo para una "forma normal" de H representativa de las órbitas de $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{R})$ bajo la acción adjunta del grupo simpléctico.

Ahora bien, en la demostración anterior el carácter real eventual de S no jugó ningún papel. De hecho, g_H es invariante por transformaciones simplécticas complejas, por lo cual nosotros preferimos clasificar los elementos de $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{R})$ módulo conjugación por $\mathrm{Sp}(2,\mathbb{C}) = \mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$. Se obtiene el siguiente resultado: los elementos de cada una de las clases de $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{R})$ consideradas anteriormente que tienen el mismo determinante forman una órbita de la acción de $\mathrm{SL}(2;\mathbb{C})$.

El resultado sería falso si nos limitaramos a la acción de $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$, pues es fácil ver que las matrices $B_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ y $B_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ no pueden satisfacer una ecuación de la forma $Q^tB_1Q = B_2$ con $Q \in \mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$, mientras que $Q = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -i & -i \\ -i & i \end{pmatrix} \in \mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ hace el trabajo. Análogamente sucede con $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ y $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

Una vez clasificadas las formas normales, es posible explicitar (11) usando representantes sencillos de ellas: por ejemplo, $B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ para $\det B > 0$; y $B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ para $\det B < 0$. Tenemos:

$$\text{(i)}\ \det B > 0: \quad {}_H\Xi(u;t) = \sec\Bigl(\sqrt{|\det B|}\,\frac{t}{2}\Bigr)\exp\biggl\{\frac{-iH}{\sqrt{|\det B|}}\tan\sqrt{|\det B|}\,\frac{t}{2}\biggr\}, \tag{12a}$$

$$\text{(ii)}\ \det B < 0: \quad {}_H\Xi(u;t) = \operatorname{sech}\Bigl(\sqrt{|\det B|}\,\frac{t}{2}\Bigr)\exp\biggl\{\frac{-iH}{\sqrt{|\det B|}}\tanh\sqrt{|\det B|}\,\frac{t}{2}\biggr\}, \tag{12b}$$

$$\text{(iii)}\ \det B = 0: \quad {}_H\Xi(u;t) = \exp\bigl(-iH\tfrac{t}{2}\bigr). \tag{12c}$$

Los grupos uniparamétricos correspondientes a los casos (ii) y (iii) tienen cubierta trivial, por lo que no esperamos ningún fenómeno de multivaluación. El grupo de (i) es más interesante. Es claro que es periódico y que podemos ceñirnos a considerar el intervalo $[0, 4\pi]$.

Los fenómenos interesantes comienzan a ocurrir cuando $t = \pi$. Se tiene $M(\pi) = -1$ necesariamente; la expresión (12a) entonces parece sin sentido, pero pasando al límite en el espacio de las distribuciones temperadas uno obtiene fácilmente ${}_H\Xi(u;\pi) = -2\pi i\,\delta(u)$. La primera crisis (correspondiente a una "cáustica") ha sido solucionada; pero ¡nótese que a $M(2\pi) = 1$ le corresponde ${}_H\Xi(u;2\pi) = -1$! Entre $t = 2\pi$ y $t = 4\pi$ la fórmula (12a) atribuye a las mismas matrices M una función con el signo contrario al que le atribuye entre $t = 0$ y $t = 2\pi$. En particular, ahora $\Xi_{-1} = 2\pi i\,\delta$.

En C_+ es posible definir de forma continua e inambigua la relación $M \mapsto \Xi_M$, tomando en cuenta que toda matriz de C_+ se encuentra sobre algún grupo uniparamétrico y usando las fórmulas (12) según sea apropiado: para matrices elípticas podría tomarse $-\pi < t < \pi$. El intento de incluir un elemento más como -1 en el cuadro queda abortado, sin embargo. En general vemos que Ξ_M está definido salvo un factor de fase, esto es, la realización $M \mapsto \Xi_M$ es proyectiva. Por supuesto, en tanto Ξ_M actúa adjuntamente como en (9) el factor de fase es irrelevante. El análisis hecho de las matrices del círculo $\begin{pmatrix} \cos\phi & -\operatorname{sen}\phi \\ \operatorname{sen}\phi & \cos\phi \end{pmatrix} \subset \mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ muestra que los Ξ_M pueden identificarse con una doble cubierta de tal subgrupo. Esto sugiere que los Ξ_M puedan ser definidos salvo el signo, constituyendo una doble cubierta de $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$. Así es en efecto, pero la demostración detallada exige amplia preparación y recursos relativamente sofisticados; será el objetivo del segundo artículo de esta serie. Se habla de la realización *metapléctica*, o de Shale–Segal–Weil [4–6], quienes fueron los primeros en notar el fenómeno, en contextos algo diferentes del nuestro. El fenómeno es verdaderamente notable, pues $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ es infinitamente conexo y en general no esperaríamos obtener más que una representación fiel de su grupo recubridor universal. Se ha usado la nomenclatura *representación espinorial* para subrayar la semejanza con la relación $\mathrm{SU}(2) \leftrightarrow SO(3)$, a pesar de las diferencias obvias.

Ahora nos emancipamos de que la matriz simpléctica representada aparezca como elemento de un subgrupo uniparamétrico. Sea $M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ perteneciente a $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$. Obtenemos:

$$C_M := \frac{M-1}{M+1} = \frac{1}{2 + \operatorname{tr} M}\begin{pmatrix} a-d & 2b \\ 2c & d-a \end{pmatrix}.$$

Usando las fórmulas anteriores, resulta:

$$\Xi_M(u) = e^{i\alpha} \exp\left\{ \frac{i}{2+a+d} \left[u^t \begin{pmatrix} c & \frac{1}{2}(d-a) \\ \frac{1}{2}(d-a) & -b \end{pmatrix} u \right] \right\},$$

que es posible usar si $M \neq -1$ y $M \notin P_-$. El factor de fase refleja la ambigüedad remanente en la elección de Ξ_M.

3. Un inciso sobre la transformada de Cayley

Es conveniente examinar un poco más de cerca la transformada de Cayley $M \mapsto \dfrac{M-1}{M+1}$ que aparece en la expresión de la función generatriz de Poincaré. La función exponencial y su inversa el logaritmo establecen una relación estándar entre $\mathfrak{sp}(2,\mathbb{R}) \simeq \mathbb{R}^3$ y $C_+ \subset \mathrm{Sp}(2,\mathbb{R})$. Ahora bien, la transformada de Cayley establece una relación entre $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{R})$ y $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ sumamente interesante. Es fácil comprobar por cálculo directo:

$$\begin{aligned}
&M \in H_+ && \Longrightarrow\ -1 < \det C_M < 0,\\
&M \in P_+ && \Longrightarrow\ \det C_M = 0,\\
&M \in E,\ M \neq -1 && \Longrightarrow\ \det C_M > 0,\\
&M \in P_-,\ M = -1 && \Longrightarrow\ C_M \text{ no está definida},\\
&M \in H_- && \Longrightarrow\ \det C_M < -1.
\end{aligned}$$

Si, como es natural y hemos hecho antes, identificamos $\mathfrak{sp}(2,\mathbb{R})$ con $\mathbb{R}^3$ mediante la relación $(x,y,z) \mapsto L = \begin{pmatrix} z & y-x \\ y+x & -z \end{pmatrix}$, se tiene $\det L = x^2 - y^2 - z^2$. La relación $\det L = -1$ en $\mathbb{R}^3$ dibuja un hiperboloide de elementos de $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{R})$ que no son la transformada de ningún elemento de $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$. De los dos componentes del complemento del hiperboloide, uno corresponde a elementos de H_- en $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$; y el otro a elementos de H_+, E o P_+. Sobre los dominios indicados la relación puede invertirse.

Parentéticamente notamos que $\det C_M \neq -1$ siempre. Esta observación es importante: en [7] hemos establecido el siguiente resultado: $\exp(\pm i u^t G u)$ es un elemento de $\mathcal{M}$ si y solo si $\det G \neq -1$.

Consideremos ahora la aplicación del álgebra de Lie simpléctica sobre sí misma dada por

$$X \mapsto X^C := \frac{e^X - 1}{e^X + 1}\,.$$

Después de un cálculo un poco largo, pero sin ninguna dificultad, ratificamos el resultado que por supuesto esperábamos en vista de (12):

$$\begin{aligned}
X^C &= \frac{X \tanh(\frac{1}{2}\sqrt{|\det X|})}{\sqrt{|\det X|}} && \text{si} \quad \det X < 0,\\
X^C &= \frac{X \tan(\frac{1}{2}\sqrt{|\det X|})}{\sqrt{|\det X|}} && \text{si} \quad \det X > 0,\\
X^C &= \tfrac{1}{2} X && \text{si} \quad \det X = 0.
\end{aligned}$$

Las propiedades de la transformación no lineal $X \mapsto X^C$ merecen un estudio más detallado: para cualquier grupo lineal G que posee una involución $*$, con la propiedad $A \in G \iff A^*\gamma A = \gamma$, donde γ es una matriz fija, el álgebra de Lie está dada por $X^*\gamma + \gamma X = 0$; y se puede definir una transformada de Cayley con análogas propiedades (en nuestro caso $*$ es transposición y γ es la matriz J). No parece, sin embargo, que nadie haya abordado seriamente el estudio de este nuevo instrumento para analizar la relación entre un grupo de Lie y su álgebra de Lie.

4. La ley de grupo

Por construcción, los elementos de un subgrupo uniparamétrico de funciones simplécticas satisfacen la ley de grupo ${}_H\Xi(t+t') = {}_H\Xi(t) + {}_H\Xi(t')$. Sin embargo, no hemos verificado dicha ley para dos elementos cualesquiera.

Sean C_1 y C_2 las transformadas de Cayley correspondientes a las matrices simplécticas M_1 y M_2. Se tiene, según (7) y (11):

$$\Xi_{M_1} \times \Xi_{M_2}(u) = F_1 F_2 \iint_{\mathbb{R}^2} \underline{dv}\,\underline{dw}\ \exp(-\tfrac{i}{2}v^t JC_1 v)\exp(-\tfrac{i}{2}w^t JC_2 w)\exp(-i(u-w)^t J(u-v))$$

donde $F_i = \dfrac{2^n}{\sqrt{\det M_i + 1}}$ para $i = 1, 2$.

Vamos a indicar cómo se hace el cálculo de esta integral sobre $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$ por el método de la fase estacionaria. Sea $\Psi(u, v, w)$ la función que aparece exponenciada en el integrando. Es:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial v} = 0 \iff C_1 v_0 - w_0 = -u; \qquad \frac{\partial \Psi}{\partial w} = 0 \iff C_2 w_0 - v_0 = u.$$

Esto da $\Psi(u, v_0(u), w_0(u)) = u^t JC_3 u$, donde $C_3 := \dfrac{M_1M_2 - 1}{M_1M_2 + 1}$, tras un cálculo laborioso, en el que se puede usar

$$\begin{aligned} C_3 &= (C_2 - 1)(1 + C_2C_1)^{-1} + (1 + C_1C_2)^{-1}(C_1 + 1) \\ &= (C_1 - 1)(1 + C_2C_1)^{-1} + (1 + C_1C_2)^{-1}(C_2 + 1). \end{aligned}$$

Entonces

$$\begin{aligned} \Xi_{M_1} \times \Xi_{M_2}(u) = F_1F_2 \exp(-\tfrac{i}{2}u^t JC_3 u) &\iint_{\mathbb{R}^2} \underline{dv}\,\underline{dw} \\ &\times \exp\bigl\{-\tfrac{i}{2}(v - v_0(u), w - w_0(u))^t A (v - v_0(u), w - w_0(u))\bigr\}. \end{aligned}$$

Aquí $2A$ es el hessiano de Ψ con respecto a (v, w). Esta integral del tipo de Fresnel contribuye con un factor de la forma $(\det A)^{-1/2}$, salvo factores de fase.

Se tiene:

$$A = \begin{pmatrix} -JC_1 & J \\ -J & -JC_2 \end{pmatrix}$$

y en consecuencia

$$\begin{aligned} \det A &= \det \begin{pmatrix} -J & 0 \\ 0 & -J \end{pmatrix} \det \begin{pmatrix} C_1 & -I \\ I & C_2 \end{pmatrix} \\ &= \det(1 + C_1C_2) = \frac{\det(M_1M_2 + 1)}{\det(M_1 + 1)\det(M_2 + 1)}. \end{aligned}$$

El resto es claro.

En todo lo anterior hemos dejado por fuera algunos detalles, por ejemplo la forma de Ξ_M para $M \in P_-$. Vamos ahora a calcular esta para el caso típico $M = \begin{pmatrix} -1 & \phi \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Los demás se pueden obtener simplemente por cambio de coordenadas. Se tiene:

$$\Xi_M = \Xi_{-I} \times \Xi_{-M} = \mp 2\pi i\, \delta \times \exp(-i\phi p^2/4) = \pm e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\pi}{\phi}}\, \delta(p) \exp(iq^2/\phi),$$

el cual, salvo por la diferencia en convenciones, es el resultado obtenido por Daubechies con un método enteramente distinto [8].

5. Estados gaussianos

Los instrumentos desarrollados hasta ahora permiten atacar importantes problemas en la teoría de estados cuánticos. Por definición, un *estado* es una funcional lineal positiva sobre $\mathcal{M}$, esto es, una función ρ tal que

$$\int \rho(u)\, (f^* \times f)(u)\, du \geqslant 0 \quad \text{para todo} \quad f \in \mathcal{M}(\mathbb{R}^{2n}).$$

Consideraremos estados normalizados por la condición $(4\pi)^{-n} \int \rho^2(u)\, du = 1$. Un estado se dice *puro* si $\rho \times \rho = \rho$.

Recientemente, Littlejohn [9] planteó y resolvió la siguiente cuestión de interés físico: ¿Cuáles funciones de forma gaussiana definidas salvo traslación, i.e., de la forma $\rho(u) = Ce^{-u^t Fu/2}$ con C una constante de normalización adecuada y F simétrica definida positiva, son estados puros?

Teorema 3 (Littlejohn)**.** *La gaussiana normalizada:*

$$\rho(u) = 2^n (\det F)^{1/4} \exp(-\tfrac{1}{2} u^t F u) \tag{13}$$

es un estado puro si y solo si F, además de definida positiva, es simpléctica.

Demostración. Introduzcamos la *transformada de Fourier simpléctica* sobre $\mathbb{R}^{2n}$:

$$\mathcal{F} f(u) := \int f(v) \exp(-iv^t Ju)\, \underline{dv}.$$

Es fácil probar que $\mathcal{F}(f \times g) = \mathcal{F} f \diamond \mathcal{F} g$, donde $\diamond$ denota la *convolución cuántica*, definida por:

$$h \diamond j(u) = \int h(u-v) j(v) e^{-iu^t Jv}\, \underline{dv}. \tag{14}$$

De modo que necesitamos demostrar $\mathcal{F}\rho \diamond \mathcal{F}\rho = \mathcal{F}\rho$. En lo que sigue haremos uso frecuente de la fórmula:

$$\int \exp(-\tfrac{1}{2} v^t B v + b^t v)\, \underline{dv} = \frac{\exp(\frac{1}{2} b^t B^{-1} b)}{\sqrt{\det B}}, \tag{15}$$

donde B es una matriz simétrica con parte real definida positiva, b un vector complejo cualquiera. Aplicándola a la gaussiana de (14):

$$\mathcal{F}\rho(u) = 2^n (\det F)^{-1/4} \exp(\tfrac{1}{2} u^t J F^{-1} J u).$$

Según (14) y (15) se tiene:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\rho \diamond \mathcal{F}\rho(u) &= \frac{4^n}{\sqrt{\det F}} \exp(\tfrac{1}{2}u^t JF^{-1}u) \int \exp(v^t JF^{-1}Jv + v^t(iJ - JF^{-1}J)u)\, \underline{dv} \\ &= 2^n \exp(\tfrac{1}{4}u^t JF^{-1}Ju) \exp(-\tfrac{1}{4}u^t Fu),\end{aligned}$$

lo cual equivale a (13) si y solo si $F = -JF^{-1}J$, esto es, por (3) y $F^t = F$, si y solo si F es simpléctica. □

Observación 1. Equivalentemente, $\mathcal{F}\rho = \rho$.

Es fácil ver que los automorfismos (8) transforman estados en estados; el carácter de "puro" o "mezcla" y la normalización también se conservan. Estamos interesados en estudiar la acción del grupo $\mathrm{Sp}(2n, \mathbb{R})$ sobre las gaussianas. Si tenemos la gaussiana estándar:

$$f_0(q, p) := 2e^{-(q^2+p^2)/2},$$

podemos obtener cualquier gaussiana de la forma de (13) mediante conjugación por $\Xi_{F^{-1/2}}$; la matriz $F^{-1/2}$ es simpléctica si F lo es, pues si $F = \exp(-JB_a)$, como en la sección 1, entonces $F^{1/2} = \exp(-\frac{1}{2}JB_a)$. Ahora bien, el grupo de isotropía de f_0 para esta conjugación es obviamente el grupo de matrices simplécticas ortogonales. Con lo cual tenemos:

$$\text{El espacio de los estados gaussianos puros} \sim \frac{\mathrm{Sp}(2n, \mathbb{R})}{\mathrm{Sp}(2n, \mathbb{R}) \cap O(2n)},$$

lo cual da una agradable interpretación de la descomposición del grupo simpléctico efectuada en la sección 1. La dimensión del espacio en cuestión es $n^2 + n$.

Retornemos al caso $n = 1$ por un momento. Una matriz $F = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ puede usarse para representar un estado puro si y solo si $a > 0$, $ac - b^2 = 1$. Ahora bien, existen estados de forma gaussiana que no son estados puros. Ejemplos son los estados de Gibbs del oscilador armónico a temperatura $1/\beta$ [3]:

$$f_\beta = \operatorname{sech}(\tfrac{1}{2}\beta)\ \exp\bigl(-\tfrac{1}{2}(q^2 + p^2)\ \tanh(\tfrac{1}{2}\beta)\bigr). \tag{16}$$

Pero de todo lo anterior es bastante claro que una matriz definida positiva arbitraria con determinante menor que 1 puede obtenerse por conjugación simpléctica a partir de una matriz del tipo $\begin{pmatrix} \sqrt{\det F} & 0 \\ 0 & \sqrt{\det F} \end{pmatrix}$. De hecho la matriz que hace el trabajo es:

$$\begin{pmatrix} a^{1/2}(\det F)^{-1/4} & ba^{-1/2}(\det F)^{-1/4} \\ 0 & a^{-1/2}(\det F)^{1/4} \end{pmatrix}.$$

En el Apéndice Apéndice B se prueba que si $\det F > 1$, entonces F no corresponde a ningún estado. Por tanto, tenemos el siguiente resultado.

Teorema 4. *Una función de la forma* $\exp(\frac{1}{2}u^t Fu)$ *con* $u \in \mathbb{R}^2$ *representa un estado cuántico normalizado si y solo si F es definida positiva y* $\det F \leqslant 1$*; los estados puros corresponden al caso* $\det F = 1$. □

Ahora bien, las formas cuadráticas del exponente se clasifican como sigue.

Teorema 5. *Toda forma cuadrática definida positiva sobre* $\mathbb{R}^{2n}$ *es simplécticamente equivalente a una dada por una matriz*

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & & \\ & \ddots & & & 0 & \\ & & \lambda_n & & & \\ & & & \lambda_1 & & \\ & 0 & & & \ddots & \\ & & & & & \lambda_n \end{pmatrix} \quad \textit{con} \quad \lambda_i > 0 \quad \textit{para} \quad i = 1, \dots, n. \tag{17}$$

La prueba se encuentra en [10]. Adecuadamente formulado, el teorema es cierto incluso en dimensión infinita.

Por el Teorema 3 y las observaciones subsiguientes, los estados puros corresponden a matrices simplécticamente conjugadas a 1. Entonces, hacemos la siguiente suposición.

Conjetura. *Una función gaussiana del tipo* (13) *representa un estado cuántico si y solo si* F *es simplécticamente conjugada a una matriz del tipo* (17) *con cada* $0 < \lambda_i \leqslant 1$*, esto es, si* F *es una matriz definida positiva con todos sus autovalores menores o iguales a la unidad. La dimensión del espacio correspondiente es* $2n^2 + n$*.*

Observación 2. Reformulada convenientemente, esta conjetura es también válida probablemente para dimensión infinita; tal resultado permitiría dar un tratamiento interesante de estados del campo libre de la radiación.

Observación 3. Es posible probar que cada una de las gaussianas del tipo (13) es la "función de Wigner" asociada a una función de onda de forma gaussiana a su vez. En este contexto, un teorema de Hudson [11], mejorado por Soto y Claverie [12] posteriormente, viene a establecer que los estados de la forma (13), con F definida positiva y simpléctica, son los únicos estados *puros* normalizables que son positivos en el sentido ordinario. ¿Cuáles estados *mezcla*, aparte de los estados gaussianos que introducimos aquí, son estados positivos en el sentido ordinario? La cuestión merece investigación.

Observación 4. Calculando formalmente la función generatriz del "hamiltoniano" $H = \frac{1}{2}u^t Bu$ con $B = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$, obtenemos $g_H(u;\beta) = -i\exp(-(q^2 + p^2)\tanh(\frac{1}{2}\beta))$. Esto es, a la matriz $M(\beta) = \begin{pmatrix} \cosh\beta & -i\operatorname{senh}\beta \\ i\operatorname{senh}\beta & \cosh\beta \end{pmatrix}$ le corresponde $\Xi_{M(\beta)} = \operatorname{sech}(\frac{1}{2}\beta)\exp(-\frac{i}{2}g_H(u;\beta))$, que es (16). Pareciera pues que se pueden extender formalmente los cálculos realizados en la sección 2 al grupo $\mathrm{SL}(2;\mathbb{C})$. En todo caso, este proceder no es objetable si $\operatorname{Im} g_H \leqslant 0$, pues entonces $\Xi_M \in \mathcal{M}$ (de hecho $\Xi_M \in \mathcal{S}$ si $\operatorname{Im} g_H < 0$) y nos da, entre otras funciones, los estados con que hemos venido trabajando. Los elementos que cumplen esta condición integran un semigrupo de $\mathrm{SL}(2;\mathbb{C})$ constituido por elementos de la forma $M_1 M(\beta) M_2$ con M_1, M_2 pertenecientes a $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$ [13].

6. Espectros y cálculo funcional

En teoría cuántica en el espacio de las fases, la forma explícita de la función de evolución es útil para calcular el espectro de un hamiltoniano H. Esto se define como el soporte de la transformada de Fourier de ${}_H\Xi$ con respecto al parámetro t:

$$ {}_H\Pi(u;\lambda) = \frac{1}{4\pi}\int_{\mathbb{R}} {}_H\Xi(u;t)\exp(it\lambda/2)\,dt. \tag{18}$$

La “medida espectral” ${}_H\Pi$ puede obtenerse también como solución de las ecuaciones de valores propios: $H \times {}_H\Pi = {}_H\Pi \times H = \lambda\, {}_H\Pi$. En el presente caso por uno u otro método se obtiene:

$$\text{(i)}\quad {}_H\Pi(u;\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(H)\,\delta\big(\lambda - (2n+1)\sqrt{|\det B|}\big), \tag{19a}$$

donde

$$f_n(H) = 2(-1)^n L_n\biggl(\frac{2H}{\sqrt{|\det B|}}\biggr)\exp\biggl(-\frac{H}{\sqrt{|\det B|}}\biggr)$$

y L_n denota el polinomio de Laguerre ordinario de grado n.

$$\text{(ii)}\quad {}_H\Pi(u;\lambda) = \frac{1}{2\pi}\Gamma\Bigl(\frac{1+i\lambda}{2}\Bigr)\Gamma\Bigl(\frac{1-i\lambda}{2}\Bigr)\exp\biggl(\frac{iH}{\sqrt{|\det B|}}\biggr)\,{}_1F_1\biggl(\frac{1+i\lambda}{2}, 1; \frac{-2iH}{\sqrt{|\det B|}}\biggr), \tag{19b}$$

$$\text{(iii)}\quad {}_H\Pi(u;\lambda) = \delta(H-\lambda). \tag{19c}$$

Es divertido constatar que el carácter real de ${}_H\Pi$ se garantiza en (19b) por la identidad de Kummer para la función hipergeométrica confluente junto con la identidad $\overline{\Gamma(z)} = \Gamma(\bar{z})$.

De (19) se deduce en cada caso respectivo, para el espectro:

$$\operatorname{sp}(H) = \bigl\{ \pm\tfrac{1}{2}\sqrt{|\det B|}, \tfrac{3}{2}\sqrt{|\det B|}, \tfrac{5}{2}\sqrt{|\det B|}, \dots \bigr\}$$

(con signo + o − según el hamiltoniano sea una función definida positiva o negativa); $\operatorname{sp}(H) = \mathbb{R}$; $\operatorname{sp}(H) = \mathbb{R}^+$ o $\mathbb{R}^-$.

La función espectral permite construir un cálculo funcional cuántico, de modo que

$$f^{\times}(H) \text{ en el sentido del producto cuántico } = \int f(\lambda)\, {}_H\Pi(u;\lambda)\, d\lambda.$$

Y así: $\operatorname{sp}(f^{\times}) = f(\operatorname{sp} H)$. Por ejemplo, de (19a), invirtiendo (18), obtenemos:

$$\begin{aligned}\operatorname{sp}({}_H\Xi(u;t)) &= \bigl\{\exp\bigl(-\tfrac{i}{2}(2n+1)\sqrt{|\det B|}\,t\bigr)\bigr\} \\ &= \Bigl\{\exp\Bigl(-i(2n+1)\arctan\sqrt{\det JC_{M(t)}}\Bigr)\Bigr\},\end{aligned}$$

donde $M(t) = \exp(tJB)$ como en la sección 2.

El interés de poder invertir el cálculo funcional cuántico debería ser obvio. Si $\underline{\mathrm{Exp}}$ denota el exponencial cuántico de (12b), notamos que de:

$$\underline{\mathrm{Exp}}(-\tfrac{1}{2}ixz) = \operatorname{sech}(\tfrac{1}{2}z)\, e^{-ix\tanh(z/2)}$$

con $x = qp$, o hamiltoniano canónicamente equivalente, brota

$$e^{-ixt} = \frac{1}{\sqrt{1-t^2}} \operatorname{Exp}(-ix \operatorname{arctanh} t). \tag{20a}$$

Análogamente, de:

$$\operatorname{Exp}(-\tfrac{1}{2}ixz) = \sec(\tfrac{1}{2}z) e^{-ix\tan(z/2)}$$

con $x = \frac{1}{2}(q^2 + p^2)$, o hamiltoniano canónicamente equivalente, obtenemos:

$$e^{-ixt} = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} \operatorname{Exp}(-ix \arctan t). \tag{20b}$$

En lo que sigue procederemos formalmente. Eliminando las unidades imaginarias de los exponentes en (20), dichas fórmulas se reescriben como:

$$e^{xt} = \frac{\operatorname{Exp}(x \arctan t)}{\sqrt{1+t^2}} =: G_1(x;t), \qquad e^{xt} = \frac{\operatorname{Exp}(x \operatorname{arctanh} t)}{\sqrt{1-t^2}} =: G_2(x;t).$$

Se pueden tratar G_1, G_2 como funciones generatrices:

$$G_1(x;t) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n^{\times}(x) \frac{t^n}{n!}, \qquad G_2(x;t) = \sum_{n=0}^{\infty} Q_n^{\times}(x) \frac{t^n}{n!}.$$

De las ecuaciones diferenciales para las G:

$$(1+t^2)\,\frac{\partial G_1}{\partial t} = (x-t) \times G_1,$$
$$(1-t^2)\,\frac{\partial G_2}{\partial t} = (x+t) \times G_2,$$

se deducen fácilmente relaciones de recurrencia de dos términos para los polinomios P_n, Q_n; los primeros resultan ser polinomios ortogonales; de hecho son los polinomios de Hahn continuos, que han emergido recientemente en una serie de aplicaciones bastante oscuras [14]; los Q_n parecen ser nuevos.

Si $f(x)$ denota una función ordinaria del hamiltoniano x tal que se tiene $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$, será $f(x) = g^{\times}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n P_n^{\times}(x)$ o $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n Q_n^{\times}(x)$ según el caso.

Estas fórmulas son la base de un método de inversión para los cálculos funcionales asociados a (19a) y (19b). Daremos en otra parte un tratamiento explícito y riguroso de estas interesantes cuestiones.

7. El caso inhomogéneo

Finalmente, estamos interesados en ver la forma de los ${}_H\Xi$ cuando extendemos la representación para incluir el álgebra de Lie del grupo de Heisenberg $\mathbb{H}_3$, con base $\{q, p, 1\}$. Sea un hamiltoniano genéricamente de la forma:

$$H = \tfrac{1}{2} u^t B u + c^t u + d.$$

Nos preguntamos por la forma de la función cuántica correspondiente.

Si $\det B \neq 0$ no aparece ningún fenómeno nuevo. En efecto, el cambio de variables $u = \tilde{u} - B^{-1}c$ transforma el hamiltoniano a

$$\widetilde{H}(\tilde{u}) = \tfrac{1}{2}\tilde{u}^t B\tilde{u} + v, \quad \text{con} \quad v := d - \tfrac{1}{2}c^t B^{-1}c.$$

Explícitamente, si $c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \\ b_2 & b_3 \end{pmatrix}$, es:

$$c^t B^{-1} c = \frac{b_3 c_1^2 - b_2 c_1 c_2 + b_1 c_2^2}{\det B}.$$

Por supuesto, la función generatriz es invariante por el cambio de coordenadas indicado, por lo cual obtenemos:

$$\det B > 0: \quad {}_H\Xi(u;t) = \sec\bigl(\tfrac{t}{2}\sqrt{|\det B|}\,\bigr)\exp\biggl(\frac{-i(H-v)\tan(\frac{t}{2})}{\sqrt{|\det B|}}\biggr)e^{-\frac{1}{2}ivt},$$
$$\det B < 0: \quad {}_H\Xi(u;t) = \operatorname{sech}\bigl(\tfrac{t}{2}\sqrt{|\det B|}\,\bigr)\exp\biggl(\frac{-i(H-v)\tanh(\frac{t}{2})}{\sqrt{|\det B|}}\biggr)e^{-\frac{1}{2}ivt}.$$

El caso $\det B = 0$ es más interesante. Supóngase que se han hecho los cambios de coordenadas canónicas necesarios para que el hamiltoniano quede en la forma $ap^2 + \alpha q + \beta p + d$. Si $\alpha = 0$, estamos esencialmente en un caso conocido. Si $\alpha \neq 0$, sin embargo, un momento de reflexión basta para convencerse de que no hay ninguna transformación lineal canónica que permita disponer del término αq. Sin merma de generalidad, podemos tomar $\beta = 0$. En tal caso, la ecuación de valores propios $H \times {}_H\Pi = {}_H\Pi \times H = \lambda H$ toma la forma:

$$\tfrac{1}{2}\alpha^2 \frac{d^2({}_H\Pi)}{dH^2} - (H - \lambda)\,{}_H\Pi = 0$$

(aceptando que ${}_H\Pi$ pueda expresarse en términos de H). Esta es una ecuación de Airy con solución regular:

$${}_H\Pi(\lambda) = \sqrt[3]{\frac{2}{\alpha^2}}\ \operatorname{Ai}\biggl(\sqrt[3]{\frac{2}{\alpha^2}}(H-\lambda)\biggr).$$

Y de ahí:

$${}_H\Xi(u;t) = \exp\biggl[-i\Bigl(\frac{Ht}{2} + \frac{\alpha^2 t^3}{48}\Bigr)\biggr]. \tag{21}$$

Esto constituye un tipo espectral nuevo. Es divertido notar que, mientras el término en q no puede ser eliminado, puede serlo el término en p^2. Ello se consigue por conjugación con la función unitaria (no simpléctica) $\exp(-ip^3/6\alpha)$:

$$e^{-ip^3/6\alpha} \times (\tfrac{1}{2}p^2 + \alpha q) \times e^{+ip^3/6\alpha} = \alpha q.$$

En resumen, nuestro tratamiento del caso inhomogéneo ha sido puramente algebraico. Nótese que el factor de fase t-dependiente en la fórmula (21), que tal vez podría considerarse sin importancia si estuviéramos representando matrices del grupo consideradas aisladamente, es de toda importancia en determinar el tipo espectral del hamiltoniano, el cual es totalmente diferente al de una partícula libre.

Invitamos al lector a determinar las fórmulas para $\Xi_{(M,c,d)}$ siendo (M, c, d) un elemento general del producto semidirecto $\mathrm{SL}(2,\mathbb{R}) \rtimes \mathbb{H}_3$. Resulta que la introducción de las matrices de P_- y H_- (no tomadas en cuenta previamente) no aporta resultados esencialmente diferentes a los que se deducen directamente de lo hecho aquí [15].

Apéndice A. Espacios simplécticos

Una forma bilineal ω sobre un espacio vectorial real V de dimensión finita se llama *simpléctica* si es no degenerada, es decir,

$$v \in V \text{ es tal que } \omega(v, v') = 0 \text{ para todo } v' \in V \implies v = 0;$$

y alternada:

$$\omega(v, v) = 0 \quad \text{para todo} \quad v \in V.$$

Diremos que (V, ω) es un *espacio simpléctico*.

Definición 1. Una *base canónica* de (V, ω) es una base $(e_1, e_2, \dots, e_n; f_1, f_2, \dots, f_n)$ del espacio vectorial V tal que:

$$\omega(e_j, e_k) = \omega(f_j, f_k) = \omega(e_j, f_k) - \delta_{jk} = 0, \quad \text{para} \quad 1 \leqslant j, k \leqslant n.$$

Proposición 7. *Todo espacio simpléctico posee una base canónica.*

Demostración. Sea $v \in V$, $v \neq 0$. Existirá otro vector v' tal que $\omega(v, v') \neq 0$. Podemos poner $\omega(v, v') = 1$. Se concluye que $\dim V \geqslant 2$. Si $\dim V = 2$, la proposición está demostrada. Si $\dim V > 2$, consideramos

$$\{v, v'\}^\perp := \{\, u : \omega(u, v) = \omega(u, v') = 0 \,\}.$$

Es claro que $\dim\{v, v'\}^\perp = \dim V - 2$ y que $v, v' \notin \{v, v'\}^\perp$. La restricción de ω a este último espacio es no degenerada, y recomienza la inducción. □

Corolario. *Todo espacio simpléctico es de dimensión par.* ⊟

Definición 2. Un endomorfismo lineal m de V se llama *simpléctico* si

$$\omega(mv, mv') = \omega(v, v') \quad \text{para todo} \quad v, v' \in V.$$

En una base canónica, ω es representada por la matriz J de (1). Si M representa m, se obtiene la relación (2).

Apéndice B. Gaussianos que no son estados

Por transformación de Fourier de la ley de grupo: ${}_H\Xi(t + t') = {}_H\Xi(t) \times {}_H\Xi(t')$, se obtiene $f_n(H) \times f_n(H) = f_n(H)$ cuando H es el hamiltoniano del oscilador armónico: las autofunciones que conmutan con H son por supuesto estados puros. Si ρ es un estado debe tenerse en particular: $\int \rho(u)\, f_n(u)\, du \geqslant 0$. Supongamos que $\rho(u) = \exp(-cH(u))$ con $c > 1$. Vamos a probar que $\int \rho(u)\, f_1(u)\, du < 0$.

Demostración. Es $f_1(H) = 2(2H - 1)e^{-H}$. Entonces:

$$\int \rho(u)\, f_1(u)\, du = \int 4H\, e^{-(c+1)H}\, dH - \int 2\, e^{-(c+1)H}\, dH = \frac{2(1-c)}{(c+1)^2} < 0.$$

Como ya observamos en la sección 5, la invariancia simpléctica permite reducir a este caso el de cualquier función de la forma $\exp(-\frac{1}{2}u^t F u)$, siendo F una matriz 2×2 definida positiva con determinante mayor que 1. □

Nota añadida en prueba. La conjetura de la sección 5 ahora es un teorema [16].

Referencias

[1] S. Lang, $SL(2, \mathbb{R})$, Addison–Wesley, Reading, MA, 1975.

[2] N. R. Wallach, *Symplectic Geometry and Fourier Analysis*, Math. Sci. Press, Brookline, MA, 1977.

[3] J. M. Gracia-Bondía, "Mecánica cuántica en el espacio de las fases: una formulación autocontenida", tesis de maestría, UCR, San José, 1986.

[4] D. Shale, "Linear symmetries of free Boson fields", Trans. Amer. Math. Soc. **103** (1962), 149–167.

[5] I. E. Segal, "Transforms for operators and symplectic automorphisms over a locally compact abelian group", Math. Scand. **13** (1963), 31–43.

[6] A. Weil, "Sur certains groupes d'opérateurs unitaires", Acta Math. **111** (1964), 143–211.

[7] M. Gadella, J. M. Gracia-Bondía, L. M. Nieto-Calzada y J. C. Várilly, "Quadratic Hamiltonians in phase space quantum mechanics", J. Phys. A **22** (1989), 2709–2738.

[8] I. Daubechies, "Coherent states on projective representation of the linear canonical transformations", J. Math. Phys. **21** (1980), 1377–1389.

[9] R. G. Littlejohn, "The semiclassical evolution of wave packets", Phys. Reports **138** (1986), 193–291.

[10] R. Abraham y J. E. Marsden, *Foundations of Mechanics*, 2ª edición, Benjamin–Cummings, Reading, MA, 1987.

[11] R. L. Hudson, “When is the Wigner quasi-probability density nonnegative?”, Reports Math. Phys. **6** (1974), 249–252.

[12] F. Soto y P. Claverie, “When is the Wigner function of multidimensional systems nonnegative?”, J. Math. Phys. **24** (1983), 97–100.

[13] P. Kramer, M. Moshinsky y T. Seligman, “Complex extensions of canonical transformations and quantum mechanics”, en: *Group Theory and Applications*, E. M. Loebl, eds., Academic Press, New York, 1975; pp. 249–332.

[14] C. M. Bender, L. R. Mead y S. S. Pinsky, “Continuous Hahn polynomials and the Heisenberg algebra”, J. Math. Phys. **28** (1987), 509–513.

[15] G. A. Hagedorn, M. Loss y J. Slawny, “Nonstochasticity of the time-dependent quadratic Hamiltonians and the spectra of canonical transformations”, J. Phys. A: Math. Gen. **19** (1986), 521–531.

[16] J. M. Gracia-Bondía y J. C. Várilly, “Nonnegative mixed states in Weyl–Wigner–Moyal theory”, Phys. Lett. A **128** (1988), 20–24.