Capítulo 2. Los operadores

2. Los operadores

En la mecánica cuántica, los operadores son objetos que se usan cotidianamente. Este capítulo está dedicado a revisar algunos conceptos relacionados con estos objetos.

Definición. Un operador, $\hat{O}$, es un objeto que transforma a una función, g, en otra, h,

$$\hat{O}g = h \ . \tag{2.1}$$

Ejemplo. Al derivar una función, $f(x)$, la función resultante, $f'(x)$, generalmente es distinta. Por lo tanto, al procedimiento de derivación se le puede asignar un operador,

$$f'(x) \equiv \frac{df}{dx} = \frac{d}{dx} f(x) = \hat{D} f(x) . \tag{2.2}$$

Al operador que produce la derivada de una función, $\hat{D}$, se le llama el operador diferencial. Al multiplicar una función por una constante, obtenemos una nueva función. Lo mismo ocurre cuando la multiplicamos por otra función. A este tipo de operadores les denominaremos operadores multiplicativos,

$$2\pi \cdot f(x) = g(x), \tag{2.3}$$

$$x \cdot f(x) = k(x). \tag{2.4}$$

Los operadores se pueden combinar formando otros más complejos,

suma de operadores: $$\left(\hat{A} + \hat{B}\right) f \equiv \hat{A}f + \hat{B}f \ , \tag{2.5}$$

composición de operadores: $$\left(\hat{A}\hat{B}\right) f \equiv \hat{A}\left(\hat{B}f\right). \tag{2.6}$$

Ejemplo. Los operadores siguientes son combinaciones de operadores sencillos:

$$\hat{M} = 1 + \frac{d}{dx}, \qquad \hat{M}f = f + f' , \tag{2.7}$$

$$\hat{N} = \frac{d}{dx} x , \qquad \hat{N}f = \frac{d}{dx}\left(xf\right). \tag{2.8}$$

Definición. El conmutador de dos operadores es el operador siguiente,

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \,. \tag{2.9}$$

Cuando el conmutador de dos operadores es igual a cero, se dice que los operadores conmutan y el orden de la aplicación de los operadores es irrelevante, $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$.

Al invertir el orden de los operadores, el conmutador cambia su signo,

$$\left[\hat{B},\hat{A}\right] = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right) = -\left[\hat{A},\hat{B}\right]. \tag{2.10}$$

Ejemplo. El conmutador $\left[\hat{N},\hat{D}\right]$ se calcula aplicando dicho operador sobre una función $\left[\hat{N},\hat{D}\right]f = \hat{N}\hat{D}f - \hat{D}\hat{N}f = \hat{N}f' - \hat{D}\dfrac{d}{dx}\left(xf\right)$ y se realizan las simplificaciones necesarias, $\left[\hat{N},\hat{D}\right]f = \dfrac{d}{dx}\left(xf'\right) - \dfrac{d}{dx}\left(xf' + f\right) = xf'' + f' - \left(xf'' + 2f'\right) = -f' = -\hat{D}f$. Así, se puede identificar que, para estos operadores, $\left[\hat{N},\hat{D}\right] = -\hat{D}$. Además, $\left[\hat{D},\hat{N}\right] = \hat{D}$.

También existen los operadores integrales, uno de ellos es la transformada de Laplace,

$$\hat{L}f \equiv \int_0^\infty e^{-tx} f\left(x\right)dx \equiv F\left(t\right). \tag{2.11}$$

2.1. Los operadores lineales

Entre la gran variedad de operadores que existen, los operadores lineales son los más comunes.

Definición: El operador, $\hat{A}$, es lineal si cumple las dos propiedades siguientes:

1) $$\hat{A}\left(cf\right) = c\hat{A}f \,, \tag{2.12}$$

2) $$\hat{A}\left(f + g\right) = \hat{A}f + \hat{A}g \,. \tag{2.13}$$

en donde f y g son funciones arbitrarias y c es cualquier escalar.

Ejemplo. El operador diferencial cumple con: $\hat{D}(cf)=cf'$, $\hat{D}(f+g)=f'+g'$. Entonces, el operador diferencial cumple con las condiciones (2.12) y (2.13). Por lo tanto, $\hat{D}$ es un operador lineal.

Para los operadores lineales, el conmutador tiene algunas propiedades adicionales,

$$\left[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right], \qquad \left[\hat{A},c\hat{B}\right]=c\left[\hat{A},\hat{B}\right], \tag{2.14}$$

$$\left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C}+\hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right], \tag{2.15}$$

en donde c es un escalar.

2.2. *Las funciones propias y los valores propios de un operador*

Para todo operador lineal existe un conjunto de funciones, $\{u_n\}$, y un conjunto de escalares, $\{a_n\}$, tales que satisfacen la ecuación

$$\hat{A}u_n=a_nu_n. \tag{2.16}$$

A esta ecuación se le conoce como la ecuación de valores propios del operador $\hat{A}$, a los escalares, a_n, se les llama valores propios del operador y a las funciones u_n se les denomina funciones propias. Al conjunto de valores propios comúnmente se le llama el espectro del operador.

Ejemplo. La función $g(x)=e^{x^2}$ es función propia del operador $\hat{G}=\frac{1}{x}\hat{D}+5$. Al aplicar este operador sobre la función g, se tiene que $\hat{G}g=\frac{1}{x}\hat{D}g+5g=2xg/x+5g=7g$. Entonces, g es una función propia del operador $\hat{G}$ con valor propio igual a 7.

Ejemplo. Para el operador $\hat{p}_x\equiv-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$, la ecuación de valores propios es la siguiente,

$$\hat{p}_x\phi_p=p\phi_p, \tag{2.17}$$

en donde p es el valor propio y ϕ_p es la función propia. Esta ecuación es una ecuación diferencial ordinaria que se puede reescribir en la forma

$$\phi_p' = \frac{ip}{\hbar}\phi_p, \tag{2.18}$$

y que tiene las siguientes soluciones,

$$\phi_p(x) = ce^{ipx/\hbar}, \tag{2.19}$$

en donde el valor propio es cualquier número real. En este caso, el espectro es continuo.

Ejemplo. Si las funciones propias de $\hat{p}_x$ deben ser periódicas, con período L,

$$\phi_p(x) = \phi_p(x+L), \tag{2.20}$$

entonces se debe cumplir la condición

$$1 = e^{ipL/\hbar}. \tag{2.21}$$

Esto es, el argumento del número complejo debe ser un múltiplo de 2π,

$$\frac{pL}{\hbar} = 2n\pi. \tag{2.22}$$

Por lo tanto,

$$p_n = \frac{2\hbar n\pi}{L}, \qquad \phi_n(x) = e^{i\frac{2\pi nx}{L}}, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{2.23}$$

En este caso, el espectro es discreto.

2.3. Los operadores hermitianos

Dentro de los operadores lineales existe un grupo de operadores que son de gran importancia en la mecánica cuántica.

Definición. El operador $\hat{O}$ es hermitiano si, para todo par de funciones f y g, se cumple la igualdad

$$\int f^*\left(\hat{O}g\right) = \int \left(\hat{O}f\right)^* g. \tag{2.24}$$

Ejemplos. Para identificar si un operador es hermitiano se deben evaluar las dos integrales de la ecuación (2.24) y ambas deben ser iguales. Para el operador $\hat{X} = x$,

$$\int f^*\left(\hat{X}g\right)=\int f^* xg=\int x\left(f^* g\right) \ , \qquad \int\left(\hat{X}f\right)^* g=\int\left(xf\right)^* g=\int x\left(f^* g\right). \qquad (2.25)$$

Dado que ambas integrales son iguales, entonces el operador $\hat{X}$ es hermitiano. En otro caso, para el operador diferencial $\hat{D}=\dfrac{d}{dx}$, las dos integrales son diferentes,

$$\int f^*\left(\hat{D}g\right)=\int f^* g'=\left(f^* g\right)\Big|_a^b-\int f'^* g\,, \qquad \int\left(\hat{D}f\right)^* g=\int f'^* g\,. \qquad (2.26)$$

La diferencia está tanto en el signo, como en la constante que proviene de la integración por partes. Este procedimiento permite analizar en otros casos que no se detallan aquí. Los operadores

$$\hat{E}=i\frac{d}{dx} \ , \qquad \hat{D}^2\equiv\hat{D}\hat{D}=\frac{d^2}{dx^2}\,, \qquad (2.27)$$

son hermitianos siempre y cuando las funciones se anulen en los bordes de su dominio.

En muchas aplicaciones, los conjuntos de funciones forman espacios vectoriales. En estos casos, las funciones tienen propiedades similares a los vectores cartesianos. En particular, es posible definir el concepto de ortogonalidad entre funciones.

Definición. Dos funciones son ortogonales si $\int f^* g=0$.

La integral $\int f^* g$ puede usarse como una definición del producto interno entre las funciones f y g, ya que cumple con las propiedades de este tipo de producto, por lo que es posible introducir conceptos tales como proyección y norma en los espacios vectoriales de funciones.

Los valores propios y las funciones propias de los operadores hermitianos tienen propiedades muy interesantes.

Teorema. Los valores propios de un operador hermitiano son reales.

Demostración. Se parte de la ecuación de valores propios del operador y se hacen algunas manipulaciones. También es necesario usar de la propiedad de hermiticidad del oprador.

$$\hat{A}u_n = a_n u_n, \qquad \left(\hat{A}u_n\right)^* = a_n^* u_n^*,$$

$$u_n^* \hat{A}u_n = u_n^* a_n u_n, \qquad \left(\hat{A}u_n\right)^* u_n = a_n u_n^* u_n,$$

$$\int u_n^* \hat{A}u_n = a_n \int u_n^* u_n = \int \left(\hat{A}u_n\right)^* u_n = \int u_n \left(\hat{A}u_n\right)^* = a_n^* \int u_n^* u_n, \tag{2.28}$$

$$\int u_n^* u_n \left(a_n - a_n^*\right) = 0,$$

$$\therefore\ a_n = a_n^*.$$

Teorema. Las funciones propias de un operador hermitiano son ortogonales, si sus valores propios son diferentes.

Demostración. En este caso, se usa la ecuación de valores propios para dos funciones propias con valor propio distinto y la ecuación (2.24).

$$\hat{A}u_n = a_n u_n, \qquad \left(\hat{A}u_m\right)^* = a_m u_m^*,$$

$$\int u_m^* \hat{A}u_n = a_n \int u_m^* u_n, \qquad \int u_n \left(\hat{A}u_m\right)^* = a_m \int u_m^* u_n, \tag{2.29}$$

$$\int u_m^* u_n \left(a_n - a_m\right) = 0,$$

$$\therefore\ \int u_m^* u_n = 0.$$

Cuando un operador tiene más de una función propia con el mismo valor propio, se dice que estas funciones son degeneradas. El teorema anterior garantiza que las funciones degeneradas son ortogonales a las funciones propias que tienen valor propio distinto, sin embargo el teorema no implica que las funciones degeneradas sean ortogonales entre ellas. Este hecho no genera ningún problema ya que siempre es posible hacer una combinación lineal de las funciones degeneradas para obtener un conjunto de funciones propias que sean ortogonales entre sí.

Siempre que sea posible, las funciones propias deberán cumplir con la condición $\int u_n^* u_n = 1$. En este caso, se dice que las funciones están normalizadas. Así, para todo par de funciones propias se cumple la condición

$$\int u_m^* u_n = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & ,n=m \\ 0 & ,n\neq m \end{cases} \quad . \tag{2.30}$$

2.3.1. La delta de Kronecker y la delta de Dirac

La delta de Kronecker, δ_{mn}, es un símbolo que puede tomar sólo dos valores, dependiendo de sus índices,

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & , \quad n=m \\ 0 & , \quad n\neq m \end{cases} \quad .$$

(2.31)

Dado que este símbolo sólo es diferente de cero cuando sus índices son iguales, las sumas que incluyen a la delta de Kronecker se simplifican fácilmente,

$$\begin{aligned} \sum_m \delta_{mn} Z_m &= \delta_{1n} Z_1 + \delta_{2n} Z_2 + \cdots + \delta_{nn} Z_n + \cdots = 0\cdot Z_1 + 0\cdot Z_2 + \cdots + 1\cdot Z_n + \cdots \\ &= Z_n \end{aligned} \quad . \tag{2.32}$$

Normalmente, una delta de Kronecker elimina a una operación de suma.

En general, las funciones propias de un operador hermitiano son ortogonales y forman un conjunto completo. Así, toda función arbitraria, $\phi(x)$, puede expresarse como una combinación lineal de los elementos de la base del espacio vectorial,

$$\phi(x) = \sum_n b_n u_n(x), \tag{2.33}$$

en donde los coeficientes b_i están dados por

$$b_i = \int u_i^*(x)\phi(x)dx \, . \tag{2.34}$$

Estos coeficientes juegan el papel de componentes y corresponden a la proyección de la función f sobre la función normalizada u_i. Finalmente, la ecuación (2.33) queda así,

$$\phi(x) = \sum_n \int u_n^*(x')\phi(x')dx' \cdot u_n(x) = \int \left[\sum_n u_n(x) u_n^*(x') \right] \phi(x')dx', \tag{2.35}$$

en donde la última integral se puede identificar como un operador integral identidad, y a su parte interna, agrupada en corchetes, se le denota con el símbolo siguiente,

$$\sum_n u_n(x)u_n^*(x') \equiv \delta(x-x'). \tag{2.36}$$

A la distribución $\delta(x-x')$ se le denomina la delta de Dirac.

La delta de Dirac es una distribución simétrica, $\delta(x-x')=\delta(x'-x)$, y algunas de sus propiedades son las siguientes:

$$\delta(x-x')=0, \text{ cuando } x \neq x',$$

$$\int \delta(x_0-x)f(x)dx = f(x_0), \tag{2.37}$$

$$\int \delta'(x_0-x)f(x)dx = -f'(x_0).$$

2.4. *La notación de Dirac*

La notación de Dirac, en su versión más simple, puede verse como una notación abreviada que permite representar a la mayoría de las operaciones entre operadores y funciones. Los símbolos de esta notación y su definición están en la Tabla 2.1

Tabla 2.1. Las definiciones de los símbolos de la notación de Dirac.

nombre	**símbolo**	**definición**
ket	$\lvert g\rangle \equiv g(x)$	función
bra	$\langle f\rvert \equiv f^*(x)$	función conjugada
braket	$\langle f \vert g\rangle \equiv \int f^* g$	integral entre una función y otra conjugada

Así, dado que un operador transforma a una función en otra, un operador también transforma a un ket en otro,

$$\hat{A}\lvert g\rangle \equiv \lvert \hat{A}g\rangle. \tag{2.38}$$

Los brakets cumplen con la siguiente condición,

$$\langle g \vert f\rangle^* = \langle f \vert g\rangle. \tag{2.39}$$

Las funciones propias de un operador hermitiano también son kets, y éstos son ortonormales, es decir, son kets ortogonales que están normalizados,

$$u_m = \left| u_m \right\rangle = \left| m \right\rangle , \qquad \left\langle n \middle| m \right\rangle = \delta_{mn} . \tag{2.40}$$

En esta notación, la propiedad de hermiticidad para un operador $\hat{O}$ toma la forma siguiente,

$$\left\langle f \middle| \hat{O} g \right\rangle = \left\langle \hat{O} f \middle| g \right\rangle . \tag{2.41}$$

Observe que, para los operadores hermitianos, el operador puede actuar tanto sobre el bra como sobre el ket, sin afectar el valor que tiene el braket. Para los operadores que no son hermitianos, esto no es posible, sin embargo existe otra opción que se presenta posteriormente.

Ejemplos del uso de la notación de Dirac.

1. Desarrollo de φ, ecuación (2.33):

$$\begin{aligned}
&\left| \varphi \right\rangle = \sum_n b_n \left| n \right\rangle , && b_i = \left\langle i \middle| \varphi \right\rangle , \\
&\varphi(x) = \sum_n u_n(x) \left[\int u_n^*(x') \varphi(x') dx' \right], && \left| \varphi \right\rangle = \sum_n \left| n \right\rangle \left\langle n \middle| \varphi \right\rangle , \\
&\sum_n u_n(x) u_n^*(x') \equiv \delta(x - x'), && \hat{I} = \sum_n \left| n \right\rangle \left\langle n \right| .
\end{aligned} \tag{2.42}$$

2. Para las funciones periódicas en el intervalo $\left[-L/2, L/2 \right]$, se tiene una base formada por las funciones propias del operador $\hat{p}_x$,

$$\left| n \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i2\pi nx/L} . \tag{2.43}$$

Los coeficientes del desarrollo de la función arbitraria φ tienen la forma

$$b_k = \left\langle k \middle| \varphi \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_{-L/2}^{L/2} e^{-i2\pi kx/L} \varphi(x) dx , \tag{2.44}$$

por lo que

$$\left|\varphi\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_k b_k e^{i2\pi kx/L} . \tag{2.45}$$

Esta ecuación corresponde al desarrollo de la función $\varphi(x)$ como una serie de Fourier.

2.5. *El operador adjunto*

Si $\hat{A}$ es un operador lineal, al operador $\hat{A}^+$ que satisface la igualdad siguiente, para todo par de funciones,

$$\int f^*\left(\hat{A}g\right) = \int\left(\hat{A}^+ f\right)^* g , \tag{2.46}$$

se le llama el adjunto del operador $\hat{A}$.

Ejemplo. El operador diferencial $\hat{D} = \frac{d}{dx}$ no es hermitiano. Observe que la ecuación 2.26 se puede escribir como $\left\langle f \middle| \hat{D}g \right\rangle = \left\langle -\hat{D}f \middle| g \right\rangle$. Entonces, el operador adjunto de $\hat{D}$ es

$$\hat{D}^+ = -\hat{D} = -\frac{d}{dx} , \tag{2.47}$$

siempre y cuando $f, g \to 0$ en los bordes del dominio de las funciones. Usando la notación de Dirac, los operadores $\hat{D}$ y $\hat{D}^+$ satisfacen la igualdad

$$\left\langle f \middle| \hat{D}g \right\rangle = \left\langle \hat{D}^+ f \middle| g \right\rangle . \tag{2.48}$$

De acuerdo con la definición del operador adjunto, un operador hermitiano es su propio adjunto. Además, todo operador lineal cumple con la propiedad: $\left(\hat{O}^+\right)^+ = \hat{O}$.

2.6. *Problemas*

1. Aplique los dos operadores $x\frac{d}{dx}$ y $\frac{d}{dx}x$ a cada una de las funciones siguientes: (a) $x\sin x$, (b) x^2e^{-3x}. Indique si siempre se obtiene el mismo resultado.

2. Demuestre que los operadores $x\frac{d}{dx}$ y $\frac{d}{dx}x$ son lineales.

3. Utilizando las propiedades de los conmutadores y $\left[\hat{x},\hat{p}\right]=i\hbar$, calcule: (a) $\left[\hat{x},\hat{p}^2\right]$, (b) $\left[\hat{x}^2,\hat{p}\right]$, (c) $\left[\hat{x}^2,\hat{p}^2\right]$, y (d) $\left[\alpha\hat{x}+\beta\hat{p},\gamma\hat{x}+\delta\hat{p}\right]$, en dónde $\alpha,\beta,\gamma,\delta$ son constantes.

4. Para cada una de las funciones siguientes: (a) e^x, (b) x^2e^{-x}, (c) $x^2e^{x^2}$, (d) e^{-x^2}, (e) xe^{-x^2}, indique si es o no función propia del operador $\left(4x^2-\frac{d^2}{dx^2}\right)$ y, en caso afirmativo, identifique el valor propio.

5. Obtenga las funciones propias de los operadores siguientes: (a) $\frac{d^2}{dx^2}$, (b) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$, (c) $\frac{d^2}{dx^2}+k^2$.

6. Indique bajo que condiciones el operador $\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\nabla$ es hermitiano. (Considere cada componente del vector y qué el vector es tridimensional.)

7. Demuestre que: (a) $\left[\hat{x}_k,\hat{p}_l\right]=i\hbar\delta_{kl}$ y (b) $\left[\hat{x}_k,\hat{p}_k^n\right]=i\hbar n\hat{p}_k^{n-1}$, en donde los operadores $\hat{x}_k$ y $\hat{p}_l$ son las componentes cartesianas de los operadores de posición y momento, respectivamente.

8. Indique si el operador $i\hat{x}$ es o no hermitiano. En caso negativo, ¿cuál es su operador adjunto?

9. Demuestre que cada uno de los operadores siguientes: (a) $i\left(\hat{A}^\dagger-\hat{A}\right)$, (b) $\left(\hat{A}^\dagger+\hat{A}\right)$ son hermitianos, cuando $\hat{A}$ es un operador lineal.