Propiedades generales de los operadores lineales. Álgebra de conmutadores.

En este apartado vamos a ver algunas de las propiedades sobre los operadores lineales y el álgebra de conmutadores que será de utilidad en el resto del curso.

Traza de un operador.

Dado un operador lineal, definimos su traza como la suma de los elementos diagonales del operador. Supongamos que trabajamos con una base ortonormal discreta dada por los vetores $\{|u_i\rangle\}$. Si consideramos un operador lineal $\hat{A}$ su traza viene dada por la siguiente expresión en la base considerada:

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}) = \sum_i \left\langle u_i \left| \hat{A} \right| u_i \right\rangle$$

La traza en un invariante que no depende de la base escogida. Por ejemplo, si consideramos otra base $\{|v_i\rangle\}$ la traza en esta base será:

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}) = \sum_j \left\langle v_j \left| \hat{A} \right| v_j \right\rangle = \sum_j \sum_i \langle v_j | u_i \rangle \left\langle u_i \left| \hat{A} \right| v_j \right\rangle = \sum_j \sum_i \left\langle u_i \left| \hat{A} \right| v_j \right\rangle \langle v_j | u_i \rangle = \sum_i \left\langle u_i \left| \hat{A} \right| u_i \right\rangle$$

de modo que la traza no depende de la base escogida, es una propiedad del operador.

Vamos a ver una propiedad de la traza del producto de dos operadores $\hat{A}\hat{B}$:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}) &= \sum_i \left\langle u_i \left| \hat{A}\hat{B} \right| u_i \right\rangle = \sum_{i,j} \left\langle u_i \left| \hat{A} \right| u_j \right\rangle \left\langle u_j \left| \hat{B} \right| u_i \right\rangle = \sum_{i,j} \left\langle u_j \left| \hat{B} \right| u_i \right\rangle \left\langle u_i \left| \hat{A} \right| u_j \right\rangle = \\
&= \sum_j \left\langle u_j \left| \hat{B}\hat{A} \right| u_j \right\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{A})
\end{aligned}$$

Por tanto, $\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B})$ $=\mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{A})$, y utilizando esta propiedad se puede comprobar fácilmente que:

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{C}\hat{A}) = \mathrm{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B})$$

Funciones de un operador.

Dado un operador lineal $\hat{A}$ podemos definir su inverso $\hat{A}^{-1}$ como el operador que verifica la siguiente condición:

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I}$$

Del mismo modo vamos a ver cómo podemos definir una función arbitraria de un operador. Por ejemplo, si consideramos el operador $\hat{x}$ el potencial será una función de este operador, de modo que nos interesa saber qué entendemos por una función de un operador.

Supongamos una función $f(x)$ que admite un desarrollo en serie en x de la forma:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n x^n$$

(puede ser, por ejemplo el desarrollo en serie de Taylor de la función $f(x)$)

En este caso, definiremos la función del operador $\hat{A}$, $f(\hat{A})$ como el siguiente operador:

$$f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{A}^n$$

Por ejemplo, podemos considerar la exponencial de un operador: $e^{\hat{A}}$. Esta función se define como el siguiente operador:

$$e^{\hat{A}} = \hat{I} + \hat{A} + \frac{\hat{A}^2}{2!} + \frac{\hat{A}^3}{3!} + \ldots + \frac{\hat{A}^n}{n!} + \ldots$$

Si la función $f(x)$ es real los coeficientes del desarrollo serán reales. En este caso, si $\hat{A}$ es hermítico $f(\hat{A})$ también será un operador hermítico.

Vamos a suponer que el ket $|\psi\rangle$ es un autovector de $\hat{A}$ de autovalor λ. En este caso se verifica fácilmente que:

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = \lambda\,|\psi\rangle \qquad \text{y} \qquad \hat{A}^n\,|\psi\rangle = \lambda^n\,|\psi\rangle$$

Por tanto

$$f(\hat{A})\,|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{A}^n\,|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \lambda^n\,|\psi\rangle = f(\lambda)\,|\psi\rangle$$

de modo que el ket $|\psi\rangle$ es también un autovector del operador $f(\hat{A})$ con autovalor $f(\lambda)$.

Como ejemplo, supongamos que en un espacio de estados de dimensión 3 tenemos un operador $\hat{A}$ representado en una determinada base por la siguiente matriz diagonal:

$$\hat{A} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

entonces el operador $e^{\hat{A}}$ en dicha base estará representado por la siguiente matriz:

$$e^{\hat{A}} \equiv \begin{pmatrix} e^1 & 0 & 0 \\ 0 & e^0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1/e \end{pmatrix}$$

Por tanto, vemos que para calcular la función de un operador lo más sencillo es cambiar a una base en la que el operador sea diagonal. Una vez calculada la función del operador podemos volver si queremos a la base original. Hay que llevar mucho cuidado con las funciones de un operador ya que no funcionan como las funciones ordinarias. Por ejemplo, en general $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} \neq e^{\hat{A}+\hat{B}}$.

Conmutadores.

En este apartado veremos algunas propiedades sobre conmutadores y cómo calcular el conmutador de dos operadores.

Por definición, dados dos operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$, ya vimos que el conmutador de los dos operadores $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ es un nuevo operador de la forma:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

El conmutador verifica las siguientes propiedades que se pueden demostrar fácilmente:

$$\begin{aligned}
&\left[\hat{A},\hat{B}\right] = -\left[\hat{B},\hat{A}\right] \\
&\left[\hat{A},(\hat{B}+\hat{C})\right] = \left[\hat{A},\hat{B}\right] + \left[\hat{A},\hat{C}\right] \\
&\left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right] = \hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right] + \left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C} \\
&\left[\hat{A},\left[\hat{B},\hat{C}\right]\right] + \left[\hat{B},\left[\hat{C},\hat{A}\right]\right] + \left[\hat{C},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] = 0 \\
&\left[\hat{A},\hat{B}\right]^{\dagger} = \left[\hat{B}^{\dagger},\hat{A}^{\dagger}\right]
\end{aligned}$$

Algunas de estas propiedades recuerdan a las que verifican los corchetes de Poisson de la mecánica clásica. Vamos a probar la tercera propiedad ya que tiene cierta importancia porque se utiliza en multitud de ocasiones:

$$\begin{aligned}
\left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \underbrace{+\hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C}} = \\
&= \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) + (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} = \hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right] + \left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C}
\end{aligned}$$

Como regla mnemotécnica podemos considerar que el operador $\hat{B}$ sale por la izquierda, quedando dentro los otros dos operadores $\hat{A}$ y $\hat{C}$, y a continuación sale el operador $\hat{C}$ por la derecha, quedando dentro los otros dos operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$.

De igual forma se pueden demostrar el resto de las propiedades. Vamos a ver algunas más.

Un operador $\hat{A}$ conmuta con cualquier potencia del operador, es decir, $\left[\hat{A},\hat{A}^n\right] = 0$. Como consecuencia un operador $\hat{A}$ conmuta con cualquier función del operador: $\left[\hat{A},f(\hat{A})\right] = 0$ para cualquier función $f(x)$.

Supongamos que dos operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan, de modo que $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = 0$, entonces $\hat{A}$ conmuta con cualquier potencia de $\hat{B}$, es decir, que en general $\left[\hat{A},\hat{B}^n\right] = 0$ para cualquier valor de n. Esta propiedad se puede probar fácilmente por inducción sobre n. Vamos a demostrarlo para $n = 2$:

$$\left[\hat{A},\hat{B}^2\right] = \left[\hat{A},\hat{B}\hat{B}\right] = \hat{B}\left[\hat{A},\hat{B}\right] + \left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{B} = 0$$

del mismo modo, si se verifica para $n-1$ podemos demostrar que se verifica para n. Es decir, que si $\left[\hat{A},\hat{B}^{n-1}\right]=0$ entonces $\left[\hat{A},\hat{B}^{n}\right]=0$:

$$\left[\hat{A},\hat{B}^{n}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\hat{B}^{n-1}\right]=\hat{B}\left[\hat{A},\hat{B}^{n-1}\right]+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{B}^{n-1}=0$$

de modo que ha quedado demostrado por inducción sobre n que $\left[\hat{A},\hat{B}^{n}\right]=0$ si $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan. De la misma forma $\hat{A}$ conmuta con cualquier función de $\hat{B}$, es decir que $\left[\hat{A},f(\hat{B})\right]=0$ e igualmente $\hat{B}$ conmuta con cualquier potencia de $\hat{A}$ y con cualquier función de $\hat{A}$.

Supongamos ahora dos operadores que no conmutan entre sí, pero que conmutan con su conmutador, es decir:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{C}\neq 0 \qquad \left[\hat{A},\hat{C}\right]=\left[\hat{B},\hat{C}\right]=0$$

Vamos a ver algunas propiedades interesantes de este tipo de operadores. Aunque pueda parecer una condición que no es habitual el hecho es que los operadores $\hat{x}$ y $\hat{p}$ la verifican, ya que:

$$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$$

de modo que $\hat{x}$ y $\hat{p}$ conmutan con su conmutador.

Voy a calcular el conmutador de $\left[\hat{A},\hat{B}^{2}\right]$:

$$\left[\hat{A},\hat{B}^{2}\right]=\hat{B}\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{B}=\hat{B}\hat{C}+\hat{C}\hat{B}=\hat{C}2\hat{B}$$

Basándonos en esta igualdad podemos calcular de la misma forma el conmutador $\left[\hat{A},\hat{B}^{3}\right]$:

$$\left[\hat{A},\hat{B}^{3}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\hat{B}^{2}\right]=\hat{B}\left[\hat{A},\hat{B}^{2}\right]+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{B}^{2}=\hat{B}\hat{C}2\hat{B}+\hat{C}\hat{B}^{2}=\hat{C}3\hat{B}^{2}$$

Podemos intuir que $\left[\hat{A},\hat{B}^{n}\right]=\hat{C}n\hat{B}^{n-1}$ y lo podemos demostrar de forma sencilla por inducción sobre n. Vamos a suponerlo para $n-1$, de modo que $\left[\hat{A},\hat{B}^{n-1}\right]=\hat{C}\left(n-1\right)\hat{B}^{n-2}$ y lo demostraremos para n:

$$\left[\hat{A},\hat{B}^{n}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\hat{B}^{n-1}\right]=\hat{B}\left[\hat{A},\hat{B}^{n-1}\right]+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{B}^{n-1}=\hat{B}\hat{C}\left(n-1\right)\hat{B}^{n-2}+\hat{C}\hat{B}^{n-1}=\hat{C}n\hat{B}^{n-1}$$

Por lo que ha quedado demostrado. Esta expresión nos recuerda a la derivada y, de hecho, podemos ver que:

$$\left[\hat{A},f\left(\hat{B}\right)\right]=\hat{C}f'\left(\hat{B}\right)$$

donde si $f\left(x\right)=\sum_n f_n x^n$, entonces $f'\left(x\right)=\sum_n f_n n x^{n-1}$. Vamos a verlo:

$$\begin{aligned}\left[\hat{A},f\left(\hat{B}\right)\right] &= \left[\hat{A},\sum_n f_n\hat{B}^{n}\right]=\sum_n f_n\left[\hat{A},\hat{B}^{n}\right]=\sum_n f_n\hat{C}n\hat{B}^{n-1}= \\ &= \hat{C}\sum_n f_n n\hat{B}^{n-1}=\hat{C}f'\left(\hat{B}\right)\end{aligned}$$

De modo que:

$$\left[\hat{A}, f\left(\hat{B}\right)\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right] f'\left(\hat{B}\right)$$

De la misma forma se demuestra que:

$$\left[f\left(\hat{A}\right), \hat{B}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right] f'\left(\hat{A}\right)$$

Para el caso particular de los operadores $\hat{x}$ y $\hat{p}$ se verifica por tanto que:

$$[\hat{x}, \hat{p}^n] = i\hbar n\hat{p}^{n-1}, \quad [\hat{x}^n, \hat{p}] = i\hbar n\hat{x}^{n-1}, \quad [\hat{x}, f(\hat{p})] = i\hbar f'(\hat{p}) \quad \text{y} \quad [f(\hat{x}), \hat{p}] = i\hbar f'(\hat{x})$$

Derivada de un operador.

Vamos a considerar un operador $\hat{A}(t)$ que depende de una variable continua t. Definimos el operador derivada de $\hat{A}(t)$ respecto de t como el siguiente operador:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\hat{A}(t + \Delta t) - \hat{A}(t)}{\Delta t}$$

Las reglas de derivación para los operadores son similares a las reglas de derivación ordinarias, teniendo en cuenta que se debe respetar el orden de los operadores. Como ejemplo:

$$\frac{d}{dt}(\hat{A} + \hat{B}) = \frac{d\hat{A}}{dt} + \frac{d\hat{B}}{dt}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{A}\hat{B} = \frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B} + \hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt}$$