Operadors

La primera cosa que vull remarcar és que la mecànica quàntica no ha inventat els operadors, aquests ja existien i eren àmpliament usats abans de l'adveniment de la mecànica quàntica.

De fet, tothom coneix l'operador "Int" que aplicat per exemple a la funció Cos x dóna lloc a:

$$\mathrm{Int}(\mathrm{Cos}\ x)=\mathrm{Sin}\ x.$$

Aquest operador té inversa i aquesta inversa és l'operador "Der" que actuant sobre Sin x dóna:

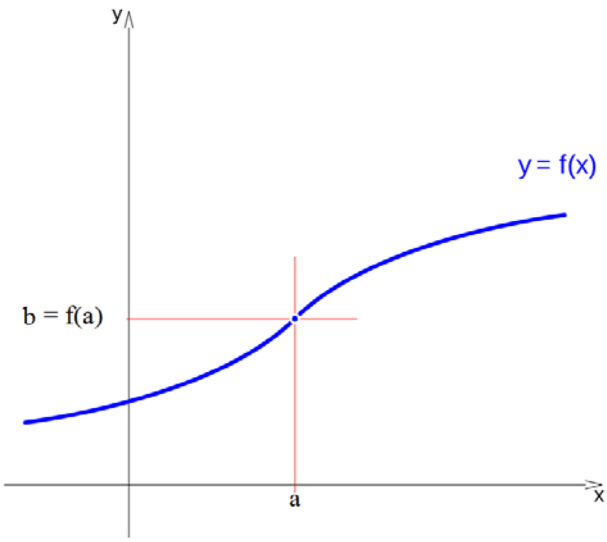
$$\mathrm{Der}(\mathrm{Sin}\ x)=\mathrm{Cos}\ x.$$

Aquests operador també són coneguts amb el nom d'integral indefinida i derivada, respectivament.

El que passa és que en obrir per primera vegada un llibre de mecànica quàntica i trobar-se amb el capítol d'operadors, hom creu que operador és un concepte nou que introdueix la teoria quàntica. I no pocs queden amb aquesta creença fins que algú el fa veure, com el filòsof al personatge de Molière, que parlava més de 40 anys en prosa sense adonar-se'n. Doncs això, des del batxillerat estem fent ús dels operadors sense donar-los un nom genèric.

Bàsicament, un operador és una funció l'argument de la qual, en lloc d'una coordenada, és una altra funció. Pot ser interessant fer un pas enrere i pensar en què és una funció.

Una funció és una correspondència, una regla, que ens diu quin número està en correspondència (segons aquesta regla) amb el número que hem triat. Per exemple, la funció Sin assigna el valor 1 al número Pi, o el valor ½ a $\pi/6$. Per això és tan útil el graf d'una funció:



La línia en blau, y = f(x), ens indica les correspondències, així a x = a li fa correspondre b:

y = f(a)=b.

Podem considerar doncs que la funció f és una correspondència entre la recta real i ella mateix f: R → R. Hi ha també funcions escalars de vàries variables, f: R^N → R o funcions vectorials de vàries variables, f: $R^N \rightarrow R^M$. En general, les funcions no tenen perquè exhaurir tot l'espai i una definició més general seria f: Domini $\subset R^N \rightarrow$ Rang $\subset R^M$.

De manera anàloga, un operador no és més que Ô: Dom $\subset V^N \rightarrow$ Ran $\subset W^M$. La funció Cos x està en el domini de l'operador integral per això podem calcular Int(Cos x). El resultat, Sin x, forma part del seu rang.

En la mecànica quàntica de Schrödinger la funció d'ona és una funció escalar, contínua i dues voltes derivable i el rang i domini dels operadors són subconjunts d'un mateix espai, i.e. Ô: Dom $\subset V^N \rightarrow$ Ran $\subset V^N$.

Com hem dit, el domini del operadors en mecànica quàntica són funcions i en un videu anterior hem vist amb detall que les funcions amb l'operació de suma de funcions i multiplicació de funcions per números són un espai vectorial, que podem normar, determinant la longitud de la funció mitjançat la integral del seu quadrat i també podem determinar l'angle entre dues funcions com l'arc-cosinus de la ratio entre el seu producte escalar dividit pel producte de les normes de les dues funcions, producte escalar que calculem com la integral del seu producte. En aquest espai podem definir una base[1] i expressar qualsevol funció d'aquest espai com una combinació lineal de la base triada:

$$f(x) = \sum_i c_i\, f_i(x)$$

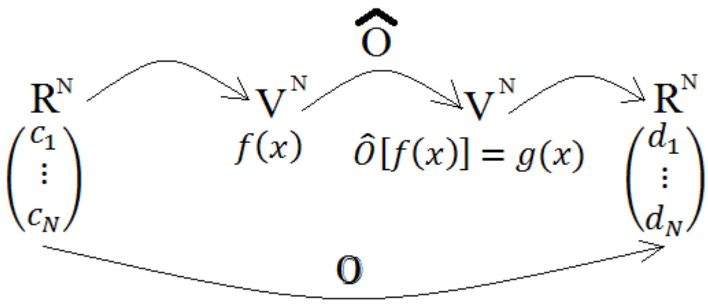
Per aquest motiu, hi ha prou en saber com actua un operador sobre els elements de base per saber com actua sobre tot el domini:

$$\hat{O}[f(x)] = \sum_i c_i\, \hat{O}[f_i(x)]$$

Tanmateix, si representem f(x) per la matriu columna,

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}$$

podrem representar l'operador per una matriu:



[1] Mentre no se diga lo contrari triarem bases ortogonals unitàries és a dir, vectors de longitud unitat, perpendiculars entre si.

Per determinar els elements de matriu de la representació matricial de l'operador Ô recordem que el coeficient c_i en l'expansió de la funció en termes de la base és el producte escalar del vector per element *i* de la base $c_i = \langle f_i | f \rangle$, que en el cas vectors d'R^3 és calcula amb el producte fila per columna i en el cas de funcions mitjançant la integral del producte de les funcions.

Aleshores, si diem que $\hat{O}[f_j(x)] = g(x) = \sum \alpha_{kj} f_k(x)$, i considerem que la base és ortonormal, tenim que:

$$\langle f_i | \hat{O} | f_j \rangle = \int f(x)_i^* \, \hat{O}[f(x)_j] \, dx = \sum \alpha_{kj} \int f(x)_i^* \, f_k(x) dx = \alpha_{ij}$$

La matriu $\boldsymbol{O}$ amb elements $\boldsymbol{O}_{ij} = \langle f_i | \hat{O} | f_j \rangle$ aplicada al vector columna $\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}$ dóna lloc a:

$$\boldsymbol{O} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_N \end{pmatrix}$$

amb $d_k = \sum_j \alpha_{kj} c_j$

Per tant, veiem que de manera semblant a com les funcions se poden representar per matrius columna 1xN, on N és la dimensió de la base, els operador se poden representar per matrius NxN, els elements de la qual són integrals $\int f(x)_i^* \, \hat{O}[f(x)_j] \, dx$.

Un dels operadors que coneixem des de Batxillerat és l'operador derivada, el qual juga un paper important en mecànica quàntica, on les funcions d'ona de sistemes lligats decauen a zero a l'infinit (d'altra manera hi hauria una probabilitat de que el sistema aplegués a l'infinit, i.e., que escapes, en el qual cas no seria lligat). La integració per parts de la integral,

$$\int f(x)^* \frac{d}{dx} \, g(x) dx = \int f(x)^* dg(x) = -\int g(x) df(x)^* = \left(\int (-\frac{d}{dx}) \, f(x)^* g(x) dx \right)$$

mostra que aquest dos operadors, d/dx i –d/dx tenen un comportament semblant. Pot "botar" davant de la primera funció i la integral no canvia Anomenem adjunt de d/dx a l'operador –d/dx i, en general, anomenem adjunt d'un operador aquell altre operador que té aquesta propietat. Tanmateix, si multipliquem l'operador derivada pel número imaginari *i* resulta que:

$$\int f(x)^* (i \frac{d}{dx}) \, g(x) dx = \left(\int [i \frac{d}{dx} \, f(x)]^* g(x) dx \right)$$

És a dir, és el seu propi adjunt. A aquests operadors que són auto-adjunts els anomenem operadors hermítics.

Podríem pensar que aquesta és una propietat curiosa. Però és molt més que una curiositat. Resulta que tots els operadors de la mecànica quàntica relacionats amb magnituds observables són hermítics i no és una casualitat. En un videu posterior veurem que els autovalors d'aquests operadors hermítics són necessàriament números reals i que aquests números són precisament els únics valors que pot assolir la magnitud física en mesurar-la. Però, aquest és el tema d'un videu posterior.