Operadores unitarios.

Vamos a analizar un tipo especial de operadores como son los operadores unitarios y que juegan el mismo papel que las transformaciones ortogonales en el espacio ordinario. Un operador unitario es aquel cuyo inverso coincide con su adjunto, es decir, un operador $\hat{U}$ se dice que es unitario si verifica la siguiente condición:

$$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{\dagger}$$

o bien

$$\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{\dagger} = \hat{I}$$

Vamos a considerar dos kets del espacio de estados $|\psi\rangle$ y $|\varphi\rangle$. Si transformamos estos dos kets por medio de un operador unitario $\hat{U}$ obtendremos unos nuevos kets transformados que notaremos por $|\bar{\psi}\rangle$ y $|\bar{\varphi}\rangle$, es decir;

$$|\bar{\psi}\rangle = \hat{U}|\psi\rangle \qquad \text{y} \qquad |\bar{\varphi}\rangle = \hat{U}|\varphi\rangle$$

Vamos a calcular el producto escalar de los vectores $|\bar{\varphi}\rangle$ y $|\bar{\psi}\rangle$:

$$\langle\bar{\varphi}|\bar{\psi}\rangle = \langle\varphi|\hat{U}^{\dagger}\hat{U}|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle$$

Es decir, que cuando transformamos los kets mediante un operador unitario los productos escalares no varían. Un operador unitario conserva el producto escalar y, por tanto, también la norma. Es similar a lo que ocurre con las transformaciones ortogonales en el espacio ordinario, como son las rotaciones. Vamos a ver algunas otras propiedades relacionadas con los operadores unitarios.

Supongamos que $\hat{A}$ es un operador hermítico. A partir de este operador podemos construir el siguiente operador unitario:

$$\hat{U} = e^{i\hat{A}}$$

Vamos a comprobar que efectivamente se trata de un operador unitario:

$$\hat{U}^{\dagger} = e^{-i\hat{A}^{\dagger}} = e^{-i\hat{A}}$$

por tanto $\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{I}$.

Si $\hat{U}$ y $\hat{V}$ son dos operadores unitarios, de modo que $\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{I}$ y $\hat{V}^{\dagger}\hat{V} = \hat{I}$, entonces el producto de los dos operadores también es unitario:

$$\left(\hat{U}\hat{V}\right)^{\dagger}\left(\hat{U}\hat{V}\right) = \hat{V}^{\dagger}\hat{U}^{\dagger}\hat{U}\hat{V} = \hat{V}^{\dagger}\hat{V} = \hat{I}$$

Vamos a ver a continuación qué condición deben verificar los elementos de matriz de un operador para que sea unitario. Supongamos que U_{ij} son los elementos de matriz de un operador unitario $\hat{U}$ en una determinada base $\{|u_i\rangle\}$, es decir que $U_{ij} = \left\langle u_i \middle| \hat{U} \middle| u_j \right\rangle$. Como el operador es unitario debe verificar que $\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{I}$. Es decir que:

$$\left\langle u_i \middle| \hat{U}^{\dagger}\hat{U} \middle| u_j \right\rangle = \delta_{ij}$$

Si insertamos la relación de cierre en esta ecuación:

$$\sum_k \left\langle u_i \middle| \hat{U}^{\dagger} \middle| u_k \right\rangle \left\langle u_k \middle| \hat{U} \middle| u_j \right\rangle = \sum_k \left(\left\langle u_k \middle| \hat{U} \middle| u_i \right\rangle\right)^* \left\langle u_k \middle| \hat{U} \middle| u_j \right\rangle = \sum_k U_{ki}^* U_{kj} = \delta_{ij}$$

Autovalores de un operador unitario.

Vamos a suponer que $|\psi\rangle$ es un autovector normalizado de un operador unitario $\hat{U}$ de autovalor λ, es decir que

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \qquad \text{y} \qquad \hat{U}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

Si tomamos el hermítico conjugado de esta expresión y la multiplicamos término a término queda:

$$\left\langle \psi \left| \hat{U}^\dagger \hat{U} \right| \psi \right\rangle = 1 = \langle\psi|\lambda^*\lambda|\psi\rangle = \lambda^*\lambda\langle\psi|\psi\rangle = \lambda^*\lambda = |\lambda|^2$$

por tanto $|\lambda|^2 = 1$. Es decir, que los autovalores de un operador unitario son números complejos de norma 1. Los autovalores se pueden escribir, por tanto, de forma general como $\lambda = e^{i\varphi}$ donde φ es un número real.

Transformación unitaria de un operador.

Vamos a suponer que tenemos una base ortonormal $\{|u_i\rangle\}$. Si transformamos los vectores de esta base mediante un operador unitario $\hat{U}$ obtendremos otra base distinta: $\left\{|\bar{u}_i\rangle = \hat{U}|u_i\rangle\right\}$. Supongamos ahora que tenemos un operador $\hat{A}$ cuyos elementos de matriz en la base $\{|u_i\rangle\}$ son los números $A_{ij} = \left\langle u_i \left| \hat{A} \right| u_j \right\rangle$. Diremos que el operador transformado de $\hat{A}$ por medio del operador $\hat{U}$, es el operador que tiene los mismos elementos de matriz que $\hat{A}$ pero en la base transformada $\{|\bar{u}_i\rangle\}$. Si notamos por $\bar{A}$ al operador transformado se debe verificar la siguiente condición:

$$\left\langle \bar{u}_i \left| \bar{A} \right| \bar{u}_j \right\rangle = \langle v_i |A| v_j\rangle$$

Podemos ver qué relación existe entre el operador $\hat{A}$ y el transformado $\bar{A}$:

$$\left\langle \bar{u}_i \left| \bar{A} \right| \bar{u}_j \right\rangle = \left\langle u_i \left| \hat{U}^\dagger \bar{A} \hat{U} \right| u_j \right\rangle = \left\langle u_i \left| \hat{A} \right| u_j \right\rangle$$

por tanto $\hat{U}^\dagger \bar{A} \hat{U} = \hat{A}$, o bien, si multiplicamos a la izquierda por $\hat{U}$ y a la derecha por $\hat{U}^\dagger$, $\bar{A} = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger$. Esto recuerda a un cambio de base.

Vamos a ver a continuación qué relación existe entre los autovalores y autovectores de $\hat{A}$ y $\bar{A}$. Supongamos que $|\psi\rangle$ es un autovector del operador $\hat{A}$ de autovalor λ, entonces:

$$\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

Si multiplicamos esta expresión por $\hat{U}$ e insertamos la expresión $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$ obtenemos lo siguiente:

$$\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = \lambda\hat{U}|\psi\rangle$$

o bien

$$\bar{A}\left|\bar{\psi}\right\rangle = \lambda\left|\bar{\psi}\right\rangle$$

donde $\left|\bar{\psi}\right\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$. Por tanto, el ket $\left|\bar{\psi}\right\rangle$ es un autovector del operador $\bar{A}$ con autovalor λ.

El carácter hermítico de un operador no se pierde cuando lo transformamos mediante un operador unitario, ya que $\hat{A}$ y $\bar{A}$ están representados por la misma matriz, aunque en distintas bases.

Por último, vamos a ver cómo se trasforma una función de un operador mediante un operador unitario. Si para un operador $\hat{A}$, $\bar{A} = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger$ entonces:

$$\left(\bar{A}\right)^2 = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger = \hat{U}\hat{A}^2\hat{U}^\dagger = \overline{A^2}$$

Del mismo modo $\bar{A}^n = \overline{A^n}$ y en definitiva $f\left(\bar{A}\right) = \overline{f(A)} = \hat{U}f(\hat{A})\hat{U}^\dagger$. Esta relación tendrá importancia más adelante: las operaciones de tomar el transformado de un operador mediante una transformación unitaria y la operación de calcular la función de un operador son operaciones que conmutan, en el sentido de que da igual el orden en el que las apliquemos.

Operador unitario infinitesimal.

Vamos, por último, a estudiar una serie de operadores unitarios que tienen gran importancia en física por estar relacionados con las operaciones de simetría. Se trata de operadores que dependen de un parámetro real continuo α, $\hat{U}(\alpha)$, de modo que $\hat{U}\left(\alpha\right)$ tiende a la identidad cuando α tiende a cero, es decir, que:

$$\lim_{\alpha\to 0}\hat{U}(\alpha) = \hat{I}$$

Podemos desarrollar el operador $\hat{U}(\alpha)$ en potencias de α (como si fuera una función ordinaria que depende de un parámetro α):

$$\hat{U}(\alpha) = \hat{I} + \alpha\hat{A} + \cdots$$

Si nos quedamos hasta primer orden en α, vamos a ver qué condición debe verificar $\hat{A}$ para que $\hat{U}(\alpha)$ sea un operador unitario hasta dicho orden:

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \left(\hat{I} + \alpha\hat{A}^\dagger + \cdots\right)\left(\hat{I} + \alpha\hat{A} + \cdots\right) = \hat{I} + \alpha\left(\hat{A}^\dagger + \hat{A}\right) + \cdots$$

Por tanto, para que $\hat{U}$ sea hermítico hasta primer orden en α se debe verificar que

$$\hat{A}^\dagger + \hat{A} = 0 \qquad \text{, o bien,} \qquad \hat{A}^\dagger = -\hat{A}$$

Un operador que verifica la condición anterior se dice que es antihermítico. A partir de $\hat{A}$ podemos definir el siguiente operador $\hat{G} = i\hat{A}$, o bien, $\hat{A} = -i\hat{G}$. Si $\hat{A}$ es antihermítico el operador $\hat{G}$ es hermítico, ya que $\hat{G}^\dagger = -i\hat{A}^\dagger = i\hat{A} = \hat{G}$. Por tanto, hasta orden α el operador unitario será de la forma

$$\hat{U}(\alpha) = \hat{I} - i\alpha\hat{G} + \cdots$$

donde el operador $\hat{G}$ es hermítico. Para valores infinitesimales del parámetro α el operador unitario $\hat{U}(\alpha)$ será de la forma $\hat{U}(\alpha) = \hat{I} - i\alpha\hat{G}$. Un operador de esta forma se dice que es un operador unitario infinitesimal. Si realizamos una transformación unitaria mediante un operador de este tipo, el operador $\hat{G}$ se dice que es el generador de la transformación.