DE LA DIFERENCIA ENTRE OPERADORES HERMÍTICOS Y AUTOADJUNTOS

ON THE DIFFERENCE BETWEEN HERMITIAN OPERATORS AND SELF-ADJOINT OPERATORS

Karen M. Fonseca[†], **Fabián Torres-Ardila**[‡]

[†]Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia - Sede Bogotá, Carrera 30 Calle 45-03, CP 111321, Bogotá, Colombia.
[‡]Center of Science and Mathematics in Context (COSMIC). University of Massachusetts, Boston, EEUU.

(Recibido: 07/2013. Aceptado: 09/2013)

Resumen

Discutimos la diferencia entre operador hermítico y operador autoadjunto, e ilustramos con ejemplos su relevancia en la descripción correcta de los sistemas cuánticos.

Palabras clave: Operadores hermíticos, Operadores autoadjuntos

Abstract

We explore the difference between the notions of hermitian and self-adjoint operator, illustrating with examples its relevance for the correct description of quantum systems.

Keywords: Hermitian Operators, Self-Adjoint Operators

Karen Fonseca: kmfonsecar@unal.edu.co,
Fabián Torres-Ardila: fabian.torres-ardila@umb.edu

Introducción

Una de las dificultades para el aprendizaje de la mecánica cuántica es su estructura formal, que la hace aparecer a veces como una rama más del análisis funcional [1]. Los físicos aprendemos una versión matemática simplificada de la mecánica cuántica [2] que, en general, resulta apropiada para nuestros propósitos.[1] La descripción cuántica usual de los sistemas físicos pasa por la definición de un espacio apropiado de estados (espacio de Hilbert $\mathcal{H}$) y de operadores *hermíticos* asociados a los observables físicos. Un operador $\hat{M}$ puede expresarse, en una base apropiada, como una matriz $\mathbb{M}$, posiblemente infinita. Se dice que $\hat{M}$ es hermítico si $\mathbb{M}$ es igual a su adjunta, la conjugada de su traspuesta [5]. La identidad entre operadores hermíticos (que tienen espectro real) y autoadjuntos (que además garantizan una base para $\mathcal{H}$) puede fallar cuando los operadores no se pueden definir en todo $\mathcal{H}$, porque se debe tener en cuenta el dominio del operador. La diferencia entre las dos nociones es especialmente importante en modelos con interacciones singulares y en sistemas físicos con fronteras. En estos casos, el proceso necesario de imponer ciertas condiciones adicionales a los hamiltonianos, da lugar a tres posibilidades: hamiltonianos no autoadjuntos que no describen sistemas físicos; hamiltonianos ambiguos que pueden describir sistemas físicos no equivalentes; o hamiltonianos que brindan una única descripcion física. El propósito de este manuscrito es brindar las herramientas para entender por qué este proceso es necesario y por qué se tienen estas alternativas.

En la sección 1 se presenta la notación usada en el resto del artículo. Las nociones de adjunto de un operador (acotado y no acotado) y de operadores no acotados hermíticos y autoadjuntos, son el tema de la sección 2. Los índices de deficiencia se introducen en las sección 3. En la sección 4 está dedicada a la dicusión de algunos ejemplos. se discuten algunos ejemplos.

[1] Algunos libros de texto que son notables excepciones a esta práctica son las referencias [3] y [4].

1. Notación empleada en este artículo

En este artículo empleamos, además de funciones de onda, la notación de Dirac. Sean $\hat{A}$ un operador lineal y $|\psi\rangle$ un vector de estado, es decir, un elemento del espacio de Hilbert $\mathcal{H}$. Cuando el operador $\hat{A}$ actúa sobre el vector de estado (ket) $|\psi\rangle$ produce un nuevo ket $\hat{A}\,|\psi\rangle$ o $|\hat{A}\psi\rangle$. Cuando el funcional lineal acotado (bra) $\langle\phi|$ actúa sobre el ket $|\psi\rangle$ produce un número complejo, $\langle\phi|\psi\rangle$. Por el teorema de representación de Riesz [6, Cap. 1], a cada ket $|\phi\rangle$ podemos asociarle un funcional lineal acotado (bra) $\langle\phi|$. Denotaremos el funcional asociado con el vector $|\hat{A}\psi\rangle$ por $\langle\hat{A}\psi|$.
Cuando el funcional $\langle\phi|$ actúa sobre un vector de estado $|\psi\rangle$, se obtiene un número, que es idéntico al producto interior entre los vectores $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$. En símbolos tenemos que $\langle\phi|\psi\rangle = (|\phi\rangle\,, |\psi\rangle)$. Dados dos vectores arbitrarios del espacio de Hilbert, digamos $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$, la norma de su producto escalar es finita, $|\,(|\phi\rangle\,, |\psi\rangle)\,| < \infty$. Cuando representamos estados cuánticos a través de funciones de onda $\psi(x)$ estamos escogiendo como un espacio de Hilbert un espacio apropiado de funciones (complejas). El bra correspondiente a la función de onda $\phi(x)$ es el funcional Φ definido por $\Phi[\psi] = \int dx\, \phi^*(x)\, \psi(x)$ que actúa sobre funciones de onda $\psi(x)$. La correspondencia entre funcionales y estados del espacio de Hilbert se ve a través de la siguiente definición de producto interno entre $\phi(x)$ y $\psi(x)$, $(\phi, \psi) = \int dx\, \phi^*(x)\, \psi(x)$.

2. El adjunto de un operador

Sea $\hat{A}$ un operador lineal definido en un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$.

Definición 1. El operador $\hat{A}^\dagger$, llamado el adjunto de $\hat{A}$, es el operador que a todo elemento del espacio de Hilbert $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ asigna el vector $\hat{A}^\dagger\,|\phi\rangle = |\hat{\phi}\rangle$ tal que

$$\langle\hat{A}^\dagger\phi|\psi\rangle = \langle\hat{\phi}|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}\psi\rangle\,, \quad \forall\,|\psi\rangle \in \mathcal{H}. \tag{1}$$

¿Tiene sentido esta definición?, es decir (1) ¿existe acaso un vector $|\hat{\phi}\rangle$ con dicha propiedad? y (2) si existe ese vector, ¿es único? La respuesta afirmativa a ambas preguntas está garantizada por el teorema de representación de Riesz bajo la condición de que el operador $\hat{A}$ sea acotado, o sea un operador para el cual la razón

$$\frac{\langle \hat{A}\psi|\hat{A}\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle},\ |\psi\rangle \neq 0, \tag{2}$$

permanece finita para todos los vectores $|\psi\rangle$. En este caso, la acción de todo operador lineal y acotado se puede representar como el producto interno con un único elemento del espacio de Hilbert [6, Cap. 2, pag. 61]. Puesto que la definición (1) sólo tiene sentido para operadores acotados, extender la noción de operador adjunto a operadores no acotados requiere imponer condiciones adicionales, pues su existencia y unicidad no estarán garantizadas *a priori*.

2.1. Operadores no acotados

La definición (1) no es aplicable a operadores no acotados, muy importantes y comunes en aplicaciones físicas. Por ejemplo, el operador momento en una dimensión, $\hat{P} = -i\frac{d}{dx}$, definido sobre el espacio de Hilbert de funciones complejas de cuadrado integrable $L^2(\mathbb{R})$, no es acotado, ya que su espectro se extiende desde valores negativos arbitrariamente grandes hasta valores positivos arbitrariamente grandes. En forma equivalente, la razón (2) diverge para funciones de cuadrado integrable, tales como $f(x) = \sqrt{x}$ si $x \in [0, 1)$ y $f(x) = 0$ en caso contrario. En efecto, la norma de $g(x) = -i\frac{df}{dx}$, dada por $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{df^*(x)}{dx}\frac{df(x)}{dx} = \int_0^1 dx \frac{1}{2x}$, diverge logarítmicamente. Así, la derivada de la función $f(x)$ no es de cuadrado integrable. Este ejemplo muestra que para el operador momento $\hat{P}$ ni siquiera el lado derecho de la definición (1) tiene sentido, salvo que se reduzca el dominio del operador a vectores o funciones de onda ϕ tales que $\hat{P}\phi$ sea de cuadrado integrable.

De hecho, el teorema de Hellinger-Toeplitz [7, Teorema 1, Pág. 15] afirma que un operador que satisfaga $(|A^\dagger\phi\rangle, |\psi\rangle) = (|\phi\rangle, |A\psi\rangle)$ para todos los vectores $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$ del espacio de Hilbert es necesariamente un operador acotado. En consecuencia, para definir un operador no acotado $\hat{A}$ y su adjunto también debemos especificar sus dominios, $\mathcal{D}(\hat{A})$ y $\mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$, los subespacios de vectores sobre los cuales actúan. Por razones técnicas, primero debemos definir que se entiende por dominio denso.

Definición 2. Dado un operador $\hat{A}$ con dominio $\mathcal{D}(\hat{A})$, se dice que $\hat{A}$ es de dominio *denso* si para todo $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$, existe una sucesión de vectores $\{|\phi_n\rangle\}$, con $|\phi_n\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A})$ tal que $|\phi_n\rangle \to |\phi\rangle$.

En forma equivalente, $\hat{A}$ es de dominio denso si cualquier vector $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ del espacio de Hilbert puede aproximarse por vectores contenidos en $\mathcal{D}(\hat{A})$, con error ϵ tan pequeño como se quiera en la norma de $\mathcal{H}$, $(|\phi_n\rangle - |\phi\rangle, |\phi_n\rangle - |\phi\rangle) < \epsilon$.

Definición 3 (Adjunto de un operador no acotado)**.** Dado $\hat{A}$ con dominio $\mathcal{D}(\hat{A})$ denso, definamos el operador adjunto $\hat{A}^\dagger$ con dominio $\mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$ [6, Cap. 6]

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(\hat{A}^\dagger) = \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} : \text{Existe } |\tau\rangle \in \mathcal{H} \text{ tal que} \\ \langle\psi|\hat{A}\phi\rangle = \langle\tau|\phi\rangle, \forall\, |\phi\rangle \in D(\hat{A})\}. \quad (3)\end{aligned}$$

Dado un elemento $|\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$, se define $\hat{A}^\dagger |\psi\rangle = |\tau\rangle$.

La diferencia entre la antigua definición (1) y la nueva (3) es que el lado derecho de la igualdad (1) se restringe *únicamente* a los vectores $|\psi\rangle$ contenidos en $\mathcal{D}(\hat{A})$, en la nueva definición. Por otro lado, en la definición (3), la unicidad del elemento $|\tau\rangle$ está garantizada porque el dominio de $\hat{A}$ es denso.

Ilustremos la definición (3) con unos ejemplos sencillos. Los operadores $\hat{A}_j\psi(x) = i\frac{d}{dx}\psi(x)$, $j = 1, 2, 3$, poseen dominios diferentes

$$\mathcal{D}(\hat{A}_1) = \{\psi(x) \in L^2([0,1]) | \psi(x) \text{ es AC y } \psi'(x) \in L^2([0,1])\},$$

$$\mathcal{D}(\hat{A}_2) = \{\psi(x) \in \mathcal{D}(\hat{A}_1) | \psi(0) = \psi(1)\}, \quad (4)$$

$$\mathcal{D}(\hat{A}_3) = \{\psi(x) \in \mathcal{D}(\hat{A}_1) | \psi(0) = 0 = \psi(1)\}, \quad (5)$$

donde el espacio de Hilbert $L^2([0,1])$ es el conjunto de funciones complejas de cuadrado integrable en el intervalo $[0,1]$. Recúerdese que una función f es AC (absolutamente continua) si su derivada $f'(x)$ existe en casi todos los puntos, es decir fuera de un conjunto de medida de Lebesgue nula, y además $f(x)$ obedece el teorema fundamental del cálculo: $f(x) = f(a) + \int_a^x f'(\xi)\, d\xi$. Para dos funciones absolutamente continuas $\phi \in \mathcal{D}(\hat{A}_j^\dagger)$ y $\psi \in \mathcal{D}(\hat{A}_j)$ tenemos

$$\int_0^1 \left(\hat{A}_j^\dagger \phi\right)^* \psi \; dx = \int_0^1 \phi^* \left(\hat{A}_j \psi\right) \; dx = \tag{6}$$
$$\int_0^1 \phi^* \left(i \frac{d\psi}{dx}\right) \; dx = i\phi^*\psi|_0^1 + \int_0^1 \left(i\frac{d\phi}{dx}\right)^* \psi \; dx.$$

En la ecuación (6) usamos la definición de adjunto e integramos por partes. Nótese que si deseamos que el último término del lado derecho sea igual a $\int_0^1 \left(\hat{A}_j^\dagger \phi\right)^* \psi \; dx$ tienen que pasar dos cosas:

1. $\hat{A}_j^\dagger \phi = i\frac{d\phi}{dx}, j = 1, 2, 3$, para todo $\phi \in \mathcal{D}(A_k^\dagger)$.

2. $\phi^*\psi|_0^1 = \phi^*(1)\psi(1) - \phi(0)^*\psi(0) = 0$ para todo $\psi \in \mathcal{D}(A_k)$ y $\phi \in \mathcal{D}(A_j^\dagger)$ con $j = 1, 2, 3$.

Combinando estas observaciones tenemos que $\mathcal{D}(\hat{A}_2) \subseteq \mathcal{D}(\hat{A}_2^\dagger)$ porque cuando ϕ y ψ pertenecen a $\mathcal{D}(\hat{A}_2)$, el término de frontera en (6) es cero. Además, en $\mathcal{D}(\hat{A}_2)$, $\hat{A}_2^\dagger = i\frac{d}{dx}$. Además $\mathcal{D}(\hat{A}_1) \subseteq \mathcal{D}(\hat{A}_3^\dagger)$: si $\phi \in \mathcal{D}(\hat{A}_1)$, la condición $\psi(0) = \psi(1) = 0$ asegura que el término de frontera en (6) sea cero. En forma similar al caso anterior, en $\mathcal{D}(\hat{A}_1)$, $\hat{A}_3^\dagger = i\frac{d}{dx}$. Desde el punto de vista de la física, con frecuencia es suficiente hacer una discusión de las condiciones de frontera adjuntas [8]. Sin embargo, puede mostrarse que las contenencias opuestas a 1. y 2. son también ciertas y por ese motivo $\hat{A}_2 = \hat{A}_2^\dagger$ y $\hat{A}_3^\dagger = \hat{A}_1$. En una versión en línea de este artículo, mostramos que $\mathcal{D}(\hat{A}_2^\dagger) \subseteq \mathcal{D}(\hat{A}_2)$.

2.2. Operadores hermíticos y autoadjuntos

Usualmente los observables fundamentales de la mecánica cuántica se suponen hermíticos, pero se ignora el papel que juega el dominio del operador en la hermiticidad del operador. Este enfoque pragmático es problemático porque las siguientes reglas i) $(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$, ii) $(c\hat{A})^\dagger = c^*\hat{A}^\dagger$, iii) $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$, pueden carecer de sentido para operadores no acotados. Por ejemplo, la regla iii) implica que para todo vector ϕ en $\mathcal{D}(\hat{B})$, $\hat{B}\phi$ está contenido en $\mathcal{D}(\hat{A})$, lo cual no está garantizado en la definición de $\hat{B}$ (el mismo argumento aplica para los dominios de los operadores adjuntos). Mostraremos además que ignorar el dominio de los operadores está en la raíz de la confusión entre operadores hermíticos (definidos a continuación) y autoadjuntos.

Definición 4. Decimos que un operador $\hat{A}$ con dominio $\mathcal{D}(\hat{A})$ denso es hermítico (también llamado simétrico) si

$$\langle \hat{A}\phi|\psi\rangle = \langle \phi|\hat{A}\psi\rangle\,, \quad \forall\,|\psi\rangle\,,|\phi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A}). \tag{7}$$

Es decir que $\hat{A}$ es hermítico si $\mathcal{D}(\hat{A}) \subseteq \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$ y $\hat{A}^\dagger$ coincide con $\hat{A}$ sobre las funciones contenidas en $\mathcal{D}(\hat{A})$, o sea $\hat{A}^\dagger\phi = \hat{A}\phi$, $\phi \in \mathcal{D}(\hat{A})$.

Como ejemplo, puede verse que si se combina la definición (7) con el cálculo mostrado en (6) los operadores $\hat{A}_2$ and $\hat{A}_3$ son ejemplos de operadores hermíticos porque el término $\phi\bar{\psi}\big|_0^1$ se hace cero cuando ψ y ϕ pertenecen a los dominios de esos operadores. Sin embargo esto no puede garantizarse si las funciones pertenecen a $\mathcal{D}(A_1)$ (por tanto $\hat{A}_1$ no es hermítico).

Definición 5. Un operador $\hat{A}$ con dominio $\mathcal{D}(\hat{A})$ es autoadjunto si $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. En otras palabras, $\hat{A}$ es autoadjunto si $\mathcal{D}(\hat{A}) \subseteq \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$, $\mathcal{D}(\hat{A}^\dagger) \subseteq \mathcal{D}(\hat{A})$ y $\hat{A}^\dagger$ coincide con $\hat{A}$ en los dominios comunes.

La diferencia esencial entre un operador hermítico y otro autoadjunto es que hermiticidad sólo requiere la condición $\mathcal{D}(\hat{A}) \subseteq \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$, mientras ser autoadjunto requiere además $\mathcal{D}(\hat{A}^\dagger) \subseteq \mathcal{D}(\hat{A})$. Normalmente en física se supone que hermítico y autoadjunto son conceptos idénticos, lo cual es verdad para operadores acotados definidos sobre todo el espacio $\mathcal{H}$. Sin embargo, existe una diferencia entre los dos conceptos para operadores no-acotados: Considérense los operadores hermíticos $\hat{A}_3$ y $\hat{A}_2$, de los cuales sólo $\hat{A}_2$ es autoadjunto. La ecuación de valores propios $i\frac{d\psi(x)}{dx} = \lambda\psi(x)$, sólo tiene la solución $\psi(x) = 0$, cuando ψ pertenece a $\mathcal{D}(\hat{A}_3)$. Por el contrario, si ψ pertenece a $\mathcal{D}(\hat{A}_2)$, las soluciones de la ecuación de valores propios son $\psi_n(x) = \psi_0 \exp(2\pi i n x), n \in \mathbb{Z}, \quad 0 \leq x \leq 1.$

Este ejemplo muestra que operadores simétricos, como $\hat{A}_3$, pueden no tener autovalores no-triviales. Por el contrario, A_2 tiene no sólo autovalores reales no-triviales sino también autovectores asociados que generan el espacio de Hilbert. De hecho, el *teorema espectral* garantiza que, bajo ciertas condiciones, un operador autoadjunto acotado tiene un conjunto de autovectores que generan todo el espacio de Hilbert [6, Cap. 4]. Este teorema, que se puede extender a operadores no-acotados, permite definir funciones de operadores, tales como la exponencial del operador, $\exp(-i\hat{A})$, necesaria en la determinación de grupos unitarios usados para describir la evolución temporal de un sistema físico [9, Vol 1, cap. VIII].
Cabe anotar que si sólo se requiere que un operador tenga valores propios reales sólo es necesario que el operador sea hermítico. Esto puede ayudar a explicar por qué se confunden hermiticidad y autoadjuntez.

3. Índices de deficiencia y extensiones autoadjuntas

Veremos en esta sección bajo que condiciones se puede extender el dominio de un operador para asegurarse que es autoadjunto. Para ilustrar el problema, considérese el operador $\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} - x^4$, que corresponde al hamiltoniano de una partícula en un potencial $V(x) = -x^4$. Tomemos como dominio de $\hat{H}$ el subespacio

$$\mathcal{D}(\hat{H}) = \{\phi \in \mathcal{D}(\hat{H}) : \phi \text{ y } -\frac{d^2\phi}{dx^2} - x^4\phi \in L^2(\mathbb{R})\}. \tag{8}$$

Este dominio parece ser el dominio *natural* del operador para asegurarse que el hamiltoniano esté bien definido y que su rango esté en $L^2(\mathbb{R})$[10]. Sin embargo, mostraremos que en este dominio el operador no es ni siquiera simétrico. Considérense dos funciones $\phi, \psi \in \mathcal{D}(\hat{H})$. Después de integrar por partes dos veces, tenemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\hat{H}\phi\right)^* \psi = \lim_{\substack{a\to-\infty \\ b\to\infty}} -\frac{d\phi^*}{dx}\psi + \phi^*\psi\Big]_a^b + \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^* \hat{H}\psi. \tag{9}$$

Para que el operador sea simétrico, el término de frontera (9) tiene que hacerse cero para todas las funciones en el dominio de $\hat{H}$. Sin embargo, cuando se considera la función:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0 & x < -N, (N > 0) \\ g(x), & -N \leq x \leq N \\ \frac{1}{x}\exp(-ix^3/3), & x > N, \end{cases}$$

donde $g(x)$ es una función suave elegida de tal forma que $\varphi(x)$ es continua y diferenciable un número apropiado de veces en $x = \pm N$, se puede mostrar que pertenece al dominio de $\hat{H}$. Calculando el término de frontera de (9) haciendo $\psi = \phi = \varphi$, tenemos $\frac{d\varphi^*}{dx}\varphi = \frac{(-i\,x^3+1)}{x^3}$. Esta expresión es igual a $-i$ cuando $x \to \infty$ y puesto que el término $\varphi^*(x)\varphi(x)$ tiende a cero en el límite $x \to \infty$ se tiene que el término de frontera no es cero y por tanto, ¡en este dominio el operador no es simétrico!. Así que no puede considerarse como un hamiltoniano que describe un sístema físico. O sea que, contrario a la práctica común en física, *ni siquiera usando el dominio natural del operador*, se asegura que sea autoadjunto. Podría pensarse que la modificación apropiada del dominio puede convertir el operador $\hat{H}$ en uno autoadjunto. Sin embargo, incluso eliminando los términos de frontera el operador no es autoadjunto [10, Vol. 2, pág. 146].
Surgen así dos preguntas: (1) ¿Bajo qué condiciones es posible modificar el dominio de $\hat{H}$ de tal forma que el operador sea autoadjunto? (2) Cuando esto sea posible, ¿puede garantizarse que el operador autoadjunto así obtenido es único? Introduzcamos el concepto de extensión de un operador para facilitar la discusión.

Definición 6 (Extensión de un operador)**.** Dados dos operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ con dominios $\mathcal{D}(\hat{A})$ y $\mathcal{D}(\hat{B})$, se dice que $\hat{A}$ es una extensión de $\hat{B}$ si $\mathcal{D}(\hat{B}) \subseteq \mathcal{D}(\hat{A})$ y $\hat{A}$ restringido a $\mathcal{D}(\hat{B})$ coincide con $\hat{B}$. En este caso se escribirá $\hat{B} \leq \hat{A}$[2] y con esta notación $\hat{B} \leq \hat{A}$ y $\hat{A} \leq \hat{B}$ implican $\hat{A} = \hat{B}$.

En este contexto, en referencia a los operadores definidos en los ejemplos de la sección anterior, $\hat{A}_3 \leq \hat{A}_1$. En forma más general, de

[2] La inclusión de dominios se puede usar para convertir al conjunto de operadores lineales en un conjunto parcialmente ordenado, y se puede usar la notación $A \leq B$.

acuerdo con la definición (4), dado un operador simétrico denso cualquiera $\hat{A}$, su adjunto es una extensión $\hat{A} \leq \hat{A}^\dagger$. Además si $\hat{B} \leq \hat{A}$ se tiene que $\hat{A}^\dagger \leq \hat{B}^\dagger$. En general, el adjunto de un operador simétrico no es una extensión autoadjunta del operador, pues ni siquiera tiene que ser simétrico. Por ejemplo el adjunto de $\hat{A}_3^\dagger$ es el operador no simétrico $\hat{A}_1$. Sin embargo, cuando la extensión de un operador simétrico por el operador adjunto, $\hat{A}^\dagger$, es simétrica, se tiene que $\hat{A} \leq \hat{A}^\dagger$ implica que $(\hat{A}^\dagger)^\dagger \leq \hat{A}^\dagger$. Por tanto $\hat{A}^\dagger \leq (\hat{A}^\dagger)^\dagger \leq \hat{A}^\dagger$. Así que $\hat{A}^\dagger$ es una extensión autoadjunta de $\hat{A}$. Estos resultados dan lugar a las siguientes preguntas (1) dado un operador $\hat{A}$ arbitrario, ¿bajo qué condiciones se puede encontrar una extensión autoadjunta de $\hat{A}$? (2) ¿cómo se pueden clasificar las extensiones autoadjuntas de un operador?

3.1. Espacios de deficiencia

Dado un operador hermítico (simétrico) $\hat{A}$, se definen los llamados *espacios de deficiencia*, $\mathcal{D}_+$ y $\mathcal{D}_-$,

$$\mathcal{D}_\pm = \{|\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger), \hat{A}^\dagger |\psi\rangle = \pm i |\psi\rangle\}.$$

La dimensión del espacio de deficiencia $\mathcal{D}_+$ ($\mathcal{D}_-$) se conoce como *índice de deficiencia n_+ (n_-)*. Estos espacios son relevantes porque

Lema 1. *[10, Vol. 2, pág. 136] Dado un operador simétrico y cerrado*[3]*,*

$$\mathcal{D}(\hat{A}^\dagger) = \mathcal{D}(\hat{A}) \oplus \mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_-. \tag{10}$$

Esta descomposición ortogonal del teorema se debe tomar con respecto al *producto interno del grafo* dado por $\langle\phi|\psi\rangle_{\hat{A}} = \langle\phi|\psi\rangle + \langle\hat{A}^\dagger\phi|\hat{A}^\dagger\psi\rangle$. Sin embargo, con el ánimo de hacer más simple la presentación, no se enfatizará mucho la diferencia entre estos productos. Nótese además que esta descomposición ortogonal del dominio de $\hat{A}^\dagger$ da cierta justificación al nombre de espacios de deficiencia, pues estos podrían ser interpretados como los elementos

[3]Un operador T es cerrado si para toda sucesión convergente $f_n \to f$ para la que $Tf_n \to F$, f pertenece al dominio de T y $F = Tf$. Esta condición ha sido verificada en los ejemplos que siguen.

que "le hacen falta" a $\mathcal{D}(\hat{A})$ para ser igual a $\mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$. Una importante consecuencia de este teorema es el llamado *Segundo Teorema de von Neumann* ([10, Vol 2, pág. 148], [11, Pág. 98]) que afirma

1. Cuando $n_+ = 0 = n_-$, el operador $\hat{A}$ tiene una <u>única</u> extensión autoadjunta; se dice que $\hat{A}$ es *esencialmente autoadjunto*,

2. Cuando $n_+ > 0$ o $n_- > 0$, pero $n_+ \neq n_-$, entonces $\hat{A}$ no admite ninguna extensión autoadjunta, y

3. Cuando $0<n_+=n_-=n<\infty$, $\hat{A}$ admite una familia n^2-paramétrica de extensiones autoadjuntas. Si $\boldsymbol{v}_+$ y $\boldsymbol{v}_-$, definidos como $\boldsymbol{v}_\pm = \big(|v_{1\pm}\rangle \dots |v_{n\pm}\rangle\big)^T$, son bases ortonormales en el producto interno usual, y si $\boldsymbol{a}_+$ y $\boldsymbol{a}_-$, definidos como $\boldsymbol{a}_\pm = \big(a_{1\pm} \dots a_{n\pm}\big)^T$, son vectores complejos de dimensión n, entonces las extensiones autodjuntas de $\hat{A}$, $\hat{A}_\mathbb{U}$, tienen dominio, $\mathcal{D}(\hat{A}_\mathbb{U}) = \{|\psi\rangle + \boldsymbol{a}_+ \cdot \boldsymbol{v}_+ + \boldsymbol{a}_- \cdot \boldsymbol{v}_-\}$, siendo $|\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A})$, $\boldsymbol{a}_- = \mathbb{U}\boldsymbol{a}_+$ y $\mathbb{U}$ unitaria.

En la práctica, si un operador tiene índices de deficiencia nulos, suponemos que se está considerando su extensión autoadjunta. Si los índices de deficiencia son iguales, pero diferentes de cero, no existe una extensión canónica. Los llamados operadores *acotados por debajo* $\hat{A}$, es decir que cumplen la propiedad $(\psi, \hat{A}\psi) \geq \gamma||\psi||^2, \ \psi \in \mathcal{D}(\hat{A}), \gamma \in \mathbb{R}$, tienen una extensión autoadjunta especial, la extensión de Friedrichs, [12, Pág. 70].

4. Ejemplos

4.1. Operador de momento en un intervalo finito

Retomemos el ejemplo del operador $\hat{A}_3$ definido en (5) cuyo adjunto puede mostrarse que es el operador $\hat{A}_1$. Los espacios de deficiencia corresponden a las soluciones de

$$-i\frac{d}{dx}\phi_\pm(x) = \pm i\phi_\pm(x), \phi(x) \in \mathcal{D}(\hat{A}_1).$$

Las soluciones son de la forma A_+e^{-x}, en el caso del espacio de deficiencia $\mathcal{D}_+$ y A_-e^{+x}, en el caso del espacio de deficiencia $\mathcal{D}_-$. Ambas soluciones son de cuadrado integrable en $[0,1]$ y absolutamente continuas y por lo tanto pertenecen al dominio de $\hat{A}_1$. De acuerdo con el teorema de von Neumann, el conjunto de extensiones autoadjuntas esta determinado por una familia uniparamétrica. Los espacios de deficiencia $\mathcal{D}_\pm$ están dados por $\mathcal{D}_\pm = \{A_\pm e^{\mp x} | A_\pm \in \mathbb{C}\}$. Las funciones $V_+ = \left(\frac{2}{e^2-1}\right)^{1/2} e^{1-x}$ y $V_- = \left(\frac{2}{e^2-1}\right)^{1/2} e^{x}$, son bases ortogonales para los respectivos espacios de deficiencia. Puesto que los espacios son unidimensionales, la única transformación unitaria permitida es multiplicar V_+ por un número $e^{i\theta}$, así que las extensiones autoadjuntas se pueden parametrizar por la familia $\{e^{i\theta} |\ \theta \in [0, 2\pi)\}$. El teorema asegura que el dominio de cada extension autoadjunta $\hat{S}$ de $\hat{A}_3$ está dado por $\mathcal{D}(\hat{S}) = \{\phi + a_+V_+ + a_-V_-\}$. En particular, nótese que para $\tau \in \mathcal{D}(\hat{S})$,

$$\tau(0) = \left(\frac{2}{e^2-1}\right)^{1/2} (a_+e + a_-),\ \tau(1) \ = \left(\frac{2}{e^2-1}\right)^{1/2} (a_+ + ea_-).$$

Por tanto, recordando que $a_+ = e^{i\theta}a_-$, se tiene que $\tau(0) = \frac{e^{i\theta}e+1}{e^{i\theta}+e}\tau(1)$. Nótese además que $\left|\frac{e^{i\theta}e+1}{e^{i\theta}+e}\right| = 1$.

Pasemos ahora a determinar la misma familia de extensiones autoadjuntas directamente, sin hacer uso del teorema de von Neumann. El operador $\hat{A}_3$ posee extensiones autoadjuntas porque es simétrico. Por una observación previa, si el adjunto de dichas extensiones simétricas es a su vez simétrico, entonces el adjunto es autoadjunto y por tanto una extensión autoadjunta de $\hat{A}_3$. Nótese además que la condición $\hat{A}_3 \subset \hat{S}$, implica $\hat{S}^\dagger \subseteq \hat{A}_3 = \hat{A}_1$, por tanto las funciones en los dominios de $\hat{S}$, y $\hat{S}^\dagger$ son absolutamente continuas y podemos usar argumentos basados en la integración por partes.

Un operador $\hat{S}$ es una extensión simétrica de $\hat{A}_3$ si existe un conjunto $\mathcal{D}(\hat{S}) \supseteq \mathcal{D}(\hat{A}_3)$ con la propiedad de que para todo par de funciones $\phi, \psi \in \mathcal{D}(\hat{S})$

$$\langle \hat{S}\phi|\psi\rangle = \langle \phi|\hat{S}\psi\rangle\ ,\ \text{y}\ , \hat{S}\,|\tau\rangle = i\tau'(x), \tau \in \mathcal{D}(\hat{A}_3). \tag{11}$$

Aplicando estas condiciones a funciones $\phi \in \mathcal{D}(\hat{S})$, $\psi \in \mathcal{D}(\hat{A}_3)$, y después de integrar por partes se tiene $\int_0^1 \left(\hat{S}\phi\right)^* \psi\ dx = \phi\bar{\psi}\big|_0^1 + \int_0^1 \left(i\frac{d\phi}{dx}\right)^* \psi\ dx$. El primer término se hace cero debido a

las condiciones impuestas sobre ψ. Así que (11) se cumple si y solo si para todo $\phi \in \mathcal{D}(\hat{S})$, $\hat{S}\phi = i\frac{d\phi}{dx}$. Una nueva aplicación de la fórmula de integración por partes muestra que para que una función ϕ esté en $\mathcal{D}(\hat{S})$ sin estar en $\mathcal{D}(\hat{A}_3)$, $|\phi(0)|^2 - |\phi(1)|^2 = 0$, lo que implica que $\phi(0) = e^{i\mu}\phi(1)$. Cuando se toma otra función $\tilde{\phi}$, el mismo tipo de argumento exige que $\tilde{\phi}(0) = e^{i\tilde{\mu}}\tilde{\phi}(1)$. Ahora, la condición (11) aplicada a $\tilde{\phi}$ y ϕ muestra que $\mu = \tilde{\mu}$. Así, las extensiones simétricas diferentes de $\hat{A}_3$ están parametrizadas por un solo parámetro $\mu \in [0, 2\pi)$.
Finalmente, determinemos el adjunto de cada extensión simétrica $\hat{S}$: considérese $\phi \in \mathcal{D}(\hat{S})$ y $\tau \in \mathcal{D}(\hat{S}^\dagger)$. Integrando por partes vemos que se debe cumplir la condición $\phi(1)\tau^*(1) - e^{-i\mu}\phi(1)\tau^*(0) = 0$. Esto implica que $\tau(0) = e^{i\mu}\tau(1)$ y por tanto $\tau \in \mathcal{D}(\hat{S})$. Entonces, todas las extensiones simétricas de $\hat{A}_3$ son autoadjuntas y que (consistente con la aplicación directa del teorema de Neumann) están parametrizadas por la familia $\{e^{i\mu} |\ \mu \in [0, 2\pi)\}$.

4.2. Hamiltoniano de una partícula libre en un intervalo finito

Consideremos el operador $\hat{H}_1$ igual a $-\frac{d^2}{dx^2}$ definido en $L^2([0,1])$ con dominio $\mathcal{D}(\hat{H}_1) = \{\psi(x), \frac{d\psi}{dx}, \frac{d^2\psi}{dx^2} \in L^2(0,1), \psi(0) = 0 = \psi(1), \frac{d\psi(0)}{dx} = 0 = \frac{d\psi(1)}{dx}, \psi(x), \psi'(x)$ absolutamente continuas. Si se consideran dos elementos arbitrarios ϕ y ψ de $\mathcal{D}(\hat{H}_1)$, encontramos

$$\begin{aligned}(\left|\phi\right\rangle, |\hat{H}_1\psi\rangle) =& -\int_0^1 dx\phi^*(x)\frac{d^2\psi}{dx^2}\\ =& -\left(\phi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{d\phi^*(x)}{dx}\psi(x)\right)\Bigg|_0^1 - \int_0^1 dx\frac{d^2\phi^*}{dx^2}\psi(x)\\ =&(|\hat{H}_1^\dagger\phi\rangle, \left|\psi\right\rangle).\end{aligned}$$

Los términos de frontera que aparecen en la integración por partes se anulan en $\mathcal{D}(\hat{H}_1)$ y por lo tanto $\hat{H}_1 = -\frac{d^2}{dx^2}$ es simétrico en este dominio.
Un cálculo similar muestra que el operador $\hat{H}_2^\dagger = -\frac{d^2}{dx^2}$ con dominio $\mathcal{D}(\hat{H}_2) = \left\{\phi(x), \frac{d\phi}{dx}, \frac{d^2\phi}{dx^2} \in L^2(0,1)\right\}$ es una extensión del operador

$\hat{H}_1$ con $\hat{H}_2 \subseteq \hat{H}^\dagger$. El operador $\hat{H}_1$ no es, por lo tanto, autoadjunto. Para determinar las extensiones autoadjuntas hallamos los espacios de deficiencia, soluciones de las ecuaciones diferenciales $-\frac{d^2\phi_+}{dx^2} = i\phi_+(x)$ y $-\frac{d^2\phi_-}{dx^2} = i\phi_-(x)$, en $\mathcal{D}(\hat{H}_1^\dagger)$. Como las soluciones de los espacios de deficiencia $\mathcal{D}_+$ y $\mathcal{D}_-$

$$\phi_\pm(x) = A_\pm \exp\left(-\frac{1 \mp i}{\sqrt{2}}x\right) + B_\pm \exp\left(\frac{1 \mp i}{\sqrt{2}}x\right),$$

pertenecen al dominio de $\hat{H}_1^\dagger$, los índices de deficiencia son $n_+ = 2 = n_-$. Esto asegura que $\hat{H}_1$ posee una familia 4−paramétrica de extensiones autoadjuntas. Para emplear el teorema de los índices de deficiencia definimos los vectores $\boldsymbol{v}_+$ y $\boldsymbol{v}_-$, cuyas componentes son los elementos de una base ortonormal para $\mathcal{D}_+$ y $\mathcal{D}_-$, respectivamente,

$$\boldsymbol{v}_+^T = \left(N_0 \cos\left(\frac{(1+i)\left(\frac{1}{2}-x\right)}{\sqrt{2}}\right), N_1 \sin\left(\frac{(1+i)\left(\frac{1}{2}-x\right)}{\sqrt{2}}\right)\right) = \boldsymbol{v}_-^*,$$

con $N_a = \sqrt[4]{2}\Big/\sqrt{\sinh\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) + (-1)^a \sin\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)}$, $a = 0, 1$. El dominio de la extensión autoadjunta caracterizada por $\mathbb{U}$ es $\mathcal{D}(\hat{A}_U) = \{|\psi\rangle + \boldsymbol{a}_+ \cdot \boldsymbol{v}_+ + \boldsymbol{a}_- \cdot \boldsymbol{v}_-\}$, siendo $|\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A})$, $\boldsymbol{a}_- = \mathbb{U}\boldsymbol{a}_+$ y $\mathbb{U}$ la matriz unitaria 2×2 más general

$$\mathbb{U} = e^{i\gamma} \left(\begin{smallmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{smallmatrix}\right),$$

en donde $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ y γ es real.

Las condiciones de frontera de la extensión autoadjunta correspondiente a $\mathbb{U}$. Para encontrar las extensiones autoadjuntas de $\hat{H}_1$ vamos a escribir los términos de superficie como $-\left(\phi^*(x)\frac{d\psi}{dx} - \frac{d\phi^*}{dx}\psi(x)\right)\Big|_0^1 = F(0) - F(1)$, en donde la función $F(x)$ puede escribirse como

$$F(x) = \left(\phi^*(x), \frac{d\phi^*}{dx}(x)\right) \mathbb{J} \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \frac{d\psi}{dx}(x) \end{pmatrix},$$

siendo $\mathbb{J}$ la matriz simpléctica $\left(\begin{smallmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{smallmatrix}\right)$. Si la función ψ y su derivada se transforman como

$$\begin{pmatrix} \psi(1) \\ \frac{d\psi}{dx}(1) \end{pmatrix} = \mathbb{A} \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \frac{d\psi}{dx}(0) \end{pmatrix},$$

en donde $\mathbb{A}$ es una matriz 2×2 de entradas complejas, entonces la función $\phi(x)$ y su derivada se deben transformar de la misma manera (asegurando que coinciden el dominio del operador y el de su adjunto). Para que el término de superficie se anule es necesario que $\mathbb{A}^\dagger \mathbb{J} \mathbb{A} = \mathbb{J}$. Si escribimos los elementos de $\mathbb{A}$ como $A_{ij} e^{\phi_{ij}}$ con A_{ij} y ϕ_{ij} reales, vemos que para que la anterior ecuación se satisfaga $\mathbb{A}$ debe ser igual a $e^{i\theta}\mathbb{S}$, en donde $\mathbb{S}$ es una matriz real de determinante 1. Teniendo en cuenta los resultados anteriores podemos afirmar que los operadores $\hat{H}_{\boldsymbol{\theta}} = \hat{H}(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4)$ definidos por $(\hat{H}_{\boldsymbol{\theta}}\psi)(x) = -\frac{d^2\psi}{dx^2}$, con dominio

$$D(\hat{H}_{\boldsymbol{\theta}}) = \left\{ \psi(x), \frac{d\psi}{dx}, \frac{d^2\psi}{dx} \in L^2[0,1] / \begin{pmatrix} \psi(1) \\ \frac{d\psi}{dx}(1) \end{pmatrix} = \mathbb{A}_{\boldsymbol{\theta}} \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \frac{d\psi}{dx}(0) \end{pmatrix} \right\},$$

son autoadjuntos. Una parametrización conveniente para las matrices $\mathbb{A}_{\boldsymbol{\theta}}$ es $\mathbb{A}_{\boldsymbol{\theta}} = e^{i\theta_1} \left(\begin{smallmatrix} a_0 + a_3 & a_1 + a_2 \\ -a_1 + a_2 & a_0 - a_3 \end{smallmatrix}\right)$, en donde $a_0 = \cos(\theta_2)\cosh(\theta_4)$, $a_1 = \sin(\theta_2)\cosh(\theta_4)$, $a_2 = \cos(\theta_3)\sinh(\theta_4)$, $a_3 = \sin(\theta_3)\sinh(\theta_4)$, $0 \leq \theta_1,\ \theta_2,\ \theta_3 < 2\pi$, $-\infty < \theta_4 < \infty$. Es importante resaltar que cada conjunto de parámetros $\boldsymbol{\theta}$ corresponde a una situación física *diferente*.

Conclusiones

En esta nota hemos mostrado que las nociones de operador autoadjunto y hermítico son diferentes para operadores que no son acotados, tales como el momento. Tal diferencia, que es una consecuencia de que los operadores no acotados solo pueden definirse en un subespacio del espacio de Hilbert, es importante para la descripción de los sistemas físicos. Los operadores hermíticos y autoadjuntos tienen propiedades diferentes. Mientras que los autovalores de los primeros son reales (si existen), solo los autovectores de operadores autoadjuntos forman una base del espacio de Hilbert; mientras que existe una base que diagonaliza

operadores autoadjuntos que conmutan, no se puede afirmar lo mismo para operadores únicamente hermíticos ([10, Vol 1, pág. 272]). Adicionalmente, hemos expuesto la noción de extensiones autoadjuntas de un operador y hemos mostrado que un mismo operador hermítico puede tener infinitas extensiones autoadjuntas, cada una de las cuales describe un sistema físico diferente. Así, vemos que esta discusión no es una mera formalidad y que, por lo tanto, la inclusión de éste y otros temas similares en los cursos de mecánica cuántica está perfectamente justificada.
Esperamos que esta nota haya no solo despertado la curiosidad del lector, sino que así mismo le haya permitido un acercamiento más profundo a la investigación moderna alrededor de este tema.

Referencias

[1] J. V. Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* (Princeton University Press, 1955).

[2] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (Oxford University Press, 1982).

[3] A. Galindo and P. Pascual, *Quantum mechanics I*, Theoretical and Mathematical Physics (Springer-Verlag, Berlin, 1990).

[4] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics: A Modern Development* (World Scientific, Singapore, 1998).

[5] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, 2nd ed. (Pearson Prentice Hall, 2004).

[6] I. Gohberg, S. Goldberg, and M. A. Kaashoek, *Basic classes of linear operators* (Birkhäuser, Basel, 2003).

[7] F. Gieres, Rep. Prog. Phys. **63**, 1893 (2000).

[8] M. Stone and P. M. Goldbart, *Mathematics for physics: a guided tour for graduate students* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2009).

[9] B. Voronov, D. Gitman, and I. Tyutin, Russ. Phys. J. **50**, 853 (2007).

[10] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics: Functional analysis*, Vol. 1 and 2 (Academic Press, New York, 1980).

[11] D. M. Gitman, I. Tyutin, and B. Voronov, *Self-adjoint Extensions in Quantum Mechanics*, Progress in Mathematical Physics, Vol. 62 (Birkhäuser Boston, New York, 2012).

[12] G. Teschl, *Mathematical methods in quantum mechanics: with applications to Schrödinger operators*, Graduate studies in mathematics, Vol. 99 (American Mathematical Society, Providence, R.I., 2009).