

LOS OPERADORES Y LOS FUNCIONALES EN LA MECÁNICA CUÁNTICA

En la mecánica cuántica se utilizan *operadores lineales* como forma de calcular las magnitudes de interés en los sistemas que se pretende modelar teóricamente.

Los operadores que involucran la acción de derivar se conocen como **operadores diferenciales** y los de integrar como **operadores integrales**.

Un **funcional** es un operador que al actuar sobre una función que depende de otras funciones, sobre las que está definido, conduce a un número.

En la mecánica cuántica que se aplica a sistemas atómicos y moleculares es frecuentemente muy útil trabajar con funcionales.

Un ejemplo, que es un caso típico de funcional, es el producto escalar de dos vectores – funciones de estado, de gran utilidad para construir modelos atómico - moleculares:

$$\langle \psi_i(q), \psi_j(q) \rangle = \langle i | j \rangle = \int_a^b \psi_i(q) \psi_j(q) dq$$

A este se le conoce como **funcional de la densidad** de las funciones $\psi_i(q)$. Si esas funciones describen el comportamiento de electrones, entonces es un **funcional de la densidad electrónica**.