# 5. Formalismo matemático de la Mecánica Cuántica I

0. Introducción. Motivación y enunciado del problema
1. Espacio $\mathscr{F}$ de las funciones de onda de cuadrado integrable.
2. Operadores lineales en $\mathscr{F}$.
3. Bases ortonormales discretas.
4. La “no-función” Delta de Dirac.
5. Relación de clausura.
6. Bases ortonomales continuas, no pertenecientes a $\mathscr{F}$.
7. Espacio de estados $\mathscr{E}$ y notación de Dirac. KETS
8. Espacio dual $\mathscr{E}^*$ y BRAS
9. Operadores lineales en $\mathscr{E}$.
10. Representaciones .

# 0. Introducción

La teoría de Schrödinger resulta complicada de aplicar:

* Salen ecuaciones diferenciales difíciles o imposibles de resolver analíticamente

* Cualquier cálculo necesita integrales complicadas incluso para una sola partícula en 1D

* Hay fenómenos físicos que ocurren y no pueden describirse mediante una función de onda, por ejemplo el spin de una partícula.

El enunciado de Dirac no contradice a Schrödinger pero:

* Aprovecha las propiedades generales de los espacios de Hilbert para sacar conclusiones mucho más fácilmente.

* Amplía las posibilidades para incluir fenómenos no descritos por la teoría de Schrödinger.

* Simplifica considerablemente la notación: Notación de Dirac.

* Su estudio es una “inversión rentable” de trabajo: los “beneficios” son considerables

# 1. Espacio $\mathscr{F}$ de las funciones de onda

Propiedad fundamental: Las funciones de onda de cuadrado integrable "suficientemente regulares" (continuas, etc) forman un espacio vectorial sobre el cuerpo de los números complejos

Veamos que forman un espacio vectorial:

$$\forall \lambda_1, \lambda_1 \in \mathscr{C}, \psi_1(\mathbf{r}), \psi_2(\mathbf{r}) \in \mathscr{F} \Rightarrow \lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r}) \in \mathscr{F}$$

Producto escalar: $\forall \varphi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}) \in \mathscr{F} \Rightarrow (\varphi, \psi) \in \mathscr{C}; \ (\varphi, \psi) \equiv \int_{\substack{todo\ el \\ espacio}} \varphi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) d^3r = (\psi, \varphi)^*$

Podemos comprobar que cumple todas las condiciones que le exigimos a un producto escalar:

$$1)\forall \psi, \varphi: \ (\psi, \varphi) = (\varphi, \psi)^*$$

$$2)\forall \psi: \ (\psi, \psi) = \int |\psi|^2 d^3r \geq 0, \in \mathscr{R}, (\psi, \psi) = 0 \Leftrightarrow \forall \mathbf{r}, \psi(\mathbf{r}) = 0$$ (función nula)

$$3)\forall \lambda \in \mathbb{C}, \psi, \varphi \in \mathscr{F}: \ (\varphi, \lambda\psi) = \lambda(\varphi, \psi); (\lambda\varphi, \psi) = \lambda^*(\varphi, \psi)$$

$$4)\forall \varphi_1, \varphi_2, \psi, \in \mathscr{F}: \ (\varphi_1 + \varphi_2, \psi) = (\varphi_1, \psi) + (\varphi_2, \psi)$$

De ahí se deducen muchas propiedades generales de los espacios con producto escalar

Ej, desigualdad de Schwarz: $|(\psi_1, \psi_2)|^2 \leq |(\psi_1, \psi_1)||(\psi_2, \psi_2)|$

# 1 Espacio $\mathscr{F}$ de las funciones de onda II

Norma: $\forall \psi \in \mathscr{F}, \|\psi\|^2 \equiv (\psi, \psi) = \int |\psi|^2 d^3 r \in \mathbb{R}$

Algunas propiedades:

$$1) \forall \psi \in F, \|\psi\| \geq 0$$

$$2) \|\psi\| = 0 \Leftrightarrow \psi = 0$$

$$3) \|\lambda \psi\| = |\lambda| \|\psi\|$$

$$4) \|\psi + \varphi\| \leq \|\psi\| + \|\varphi\|$$

(Desigualdad triangular)

# 2 Operadores lineales en $\mathscr{F}$

*A* se llama “operador lineal” ( o “aplicación lineal”), que transforma una función $\psi$ en otra $\psi' \equiv A\psi$ si cumple:

a) Se aplica a cualquier función del espacio dando un resultado único

b) $\forall \lambda_1, \lambda_2, \psi_1, \psi_2 : A\left(\lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r})\right) = \lambda_1 A\,\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2 A\,\psi_2(\mathbf{r})$

Ejemplos (probar que son lineales):

1) Paridad: $\Pi\Psi(x,y,z) = \Psi(-x,-y,-z)$

2) X = Multiplicación por x: $X\Psi(x,y,z) = x\,\Psi(x,y,z)$

3) Derivada parcial $D_x\psi = \dfrac{\partial\Psi(x,y,z)}{\partial x}$

## Suma de operadores

Se define *A*+*B* como: $(A+B)\psi \equiv A\,\psi + B\,\psi$

Operador nulo $\mathbb{O}$ es el que transforma cualquier función en la función nula: $\psi_{nula}(xyz)=0$ para cualquier *x,y,z*

$$\mathbb{O}\psi(\mathbf{r}) = \psi_{nula}(\mathbf{r}) = 0, \forall \mathbf{r}$$

## Producto de operadores

Se define *AB* (*A* después de *B*) como la aplicación de *A* a la función resultante de aplicar *B* :

$$(AB)\psi \equiv A[B\psi]$$

Propiedad 1: existe el "elemento neutro" o "operador identidad" que transforma una función en sí misma : $\mathbb{1}\psi \equiv \psi$

Propiedad importante 2: el producto de operadores lineales no es conmutativo, es decir

$$\exists A, B \text{ tales que } AB \neq BA$$

Definición: "conmutador" de *A* y *B* es el operador lineal: $[A,B] = AB - BA$

Ejemplos: 1) sea $A = X$ y $B = D_x$

$$[X, D_x] = -\mathbb{1}$$

2) sea $A = X$ y $B = D_y$ $\quad [X, D_y]\psi(\mathbf{r}) = x\dfrac{\partial \Psi}{\partial y} - \dfrac{\partial}{\partial y}(x\Psi) = x\dfrac{\partial \Psi}{\partial y} - \dfrac{\partial x}{\partial y}\psi - x\dfrac{\partial \Psi}{\partial y} = 0$

$$[X, D_y] = \mathbb{0}$$

## 3. Bases ortonormales "discretas"

Sea un conjunto numerable (o "discreto") de funciones de $\mathscr{F}$:$\{u_1(\mathbf{r}), u_2(\mathbf{r}),\ldots u_n(\mathbf{r}),\ldots\}$

"Numerable" o "discreto" quiere decir que a todas las funciones se les puede asignar un índice entero distinto, o matemáticamente que se puede establecer una correspondencia biunívoca con el conjunto de los números naturales $\mathbb{N}$.

El conjunto se dice base si 1) cualquier función del espacio se puede escribir como combinación lineal de las $u_i$, pero 2) ninguna $u_i$ se puede escribir como combinación lineal de las demás:

$$\forall \psi \in \mathscr{F} \quad \exists c_i \in \mathbb{C} \text{ tales que } \psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r})$$

$$\text{y además } \sum_i c_i u_i(\mathbf{r}) = \psi_{nula} = 0 \quad \forall \mathbf{r} \Rightarrow c_i = 0 \quad \forall i$$

El conjunto se dice ortonormal si 3) el producto escalar de dos funciones distintas es cero y de dos iguales es la unidad.

$$(u_i, u_j) = \int_{\substack{\text{todo el} \\ \text{espacio}}} u_i^*(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}) d^3 r = \delta_{ij}$$

El símbolo "delta de Kronecker" significa:
$$\delta_{ij} = \begin{matrix} 1 \text{ si } i = j \\ 0 \text{ si } i \neq j \end{matrix}$$

El conjunto se dice base ortonormal si cumple las tres propiedades anteriores

# Bases ortonormales “discretas” II

En el espacio $\mathscr{F}$ es posible encontrar bases ortonormales discretas, aunque tienen siempre infinitos elementos (espacio de dimensión infinita, pero “separable”).

Ejemplo: las funciones que corresponden a energías definidas del oscilador armónico en 1D constituyen una base ortonormal

$$\boxed{\varphi_n(x) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n \quad n!}} \mathrm{e}^{-\beta^2 x^2/2} H_n(\beta x)}$$

# Componentes de una función en la base $\{u_i(\mathbf{r})\}$

Dada una base y una función $\psi(r)$ cualquiera es muy fácil obtener los coeficientes $c_i$

Receta:

1) Para obtener un coeficiente $c_j$, multipicamos $\psi(r)$ por $u_j^*(\mathbf{r})$ .

2) Integramos a todo el espacio:

$$\left(u_j,\psi\right)=\int_{\substack{\text{todo el}\\ \text{espacio}}} u_j^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d^3r=\sum_i \int_{\substack{\text{todo el}\\ \text{espacio}}} u_j^*(\mathbf{r})c_i u_i(\mathbf{r})d^3r=$$

$$\sum_i c_i \int_{\substack{\text{todo el}\\ \text{espacio}}} u_j^*(\mathbf{r})u_i(\mathbf{r})d^3r=\sum_i c_i\delta_{ij}=c_j \Rightarrow \qquad \boxed{c_j=\left(u_j,\psi\right)}$$

Producto escalar en componentes. Sea $\varphi(\mathbf{r})=\sum_i b_i u_i(\mathbf{r}),\ \ \psi(\mathbf{r})=\sum_j c_j u_j(\mathbf{r})$

$$\left(\varphi,\psi\right)=\int\varphi^*\psi d^3r=\sum_{ij}\int b_i^* u_j^*(\mathbf{r})c_i u_i(\mathbf{r})d^3r=\sum_{ij} b_i^* c_j\delta_{ij}=\sum_i b_i^* c_i$$

Que se reduce a la conocida fórmula si las componentes son reales

La norma de una función: $\left(\psi,\psi\right)=\|\psi\|^2=\sum_i c_i^* c_i=\sum_i |c_i|^2$

# ESPACIO DE HILBERT

Un espacio “de Hilbert” es un espacio vectorial sobre el cuerpo complejo, con producto escalar y “completo”, es decir en el que toda sucesión de Cauchy es convergente a un vector del espacio.

El espacio de las funciones de cuadrado integrable es un espacio de Hilbert

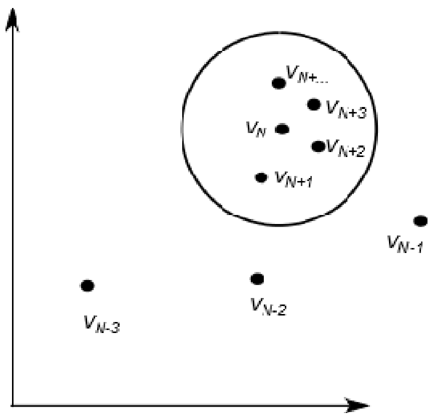
Donde la “distancia” entre dos funciones se define como:

$$d(\psi_1,\psi_2)^2 = \|\psi_1 - \psi_2\|^2 = \int_{\substack{\text{todo el}\\ \text{espacio}}} |\psi_1(xyz) - \psi_2(xyz)|^2 \, dxdydz \geq 0, \in \mathrm{R}$$

Una sucesión es de Cauchy si dado $\varepsilon > 0$, existe un número natural $N$ tal que

$$\|\psi_n - \psi_m\| < \varepsilon, \forall n,m > N$$

Gráficamente, representando los vectores por puntos, sucesion de Cauchy quiere decir que dada una esfera de radio e, por pequeño que sea, a partir de un $N$ dado todos los vectores están dentro de dicha esfera.



Un ejemplo de conjunto no completo es Q (n$^{os}$ racionales):

La sucesión de números racionales:

$$a_1 = 1, a_2 = 1 + \frac{1}{2^2}, a_3 = 1 + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2}, a_4 = 1 + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{4^2}, \ldots$$

Es de Cauchy y converge en *R* al número, $\pi^2/6$, que no es racional, por lo tanto *Q* no es completo, aunque sí es espacio vectorial (de dimensión 1, siendo el nº 1, él solo, una base ortonormal) sobre el cuerpo Q.

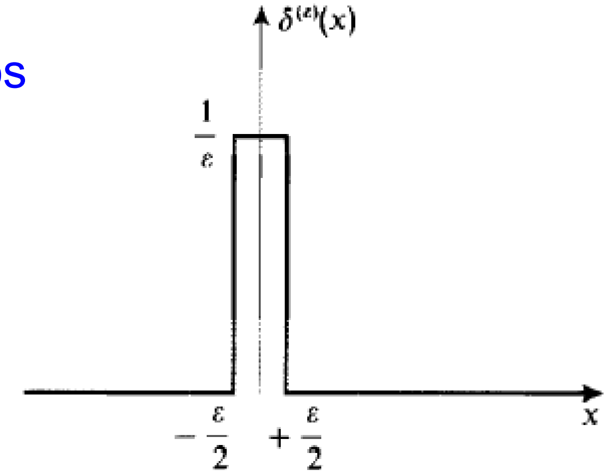
# 4. Interludio matemático :“La NO-Función” “delta” de Dirac en 1 D

Consideremos la función “rectángulo” de anchura $\varepsilon$ y altura $1/\varepsilon$:

$$\delta^{\varepsilon}(x) = \begin{cases} 1/\varepsilon \text{ si } -\varepsilon/2 < x < \varepsilon/2 \\ 0 \text{ en cualquier otro caso} \end{cases}$$

Sea ahora una función cualquiera $f(x)$ y calculemos la integral de $f(x)\delta^{\varepsilon}(x)$ si $\varepsilon$ es muy pequeño:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta^{\varepsilon}(x)dx = \frac{1}{\varepsilon}\int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} f(x)dx \cong \frac{1}{\varepsilon} f(0)\varepsilon = f(0)$$




La “función” (rigurosamente no es una función pero la vamos a usar como si lo fuera) “delta de Dirac” $\delta(x)$ es el límite puntual de $\delta^{\varepsilon}(x)$ cuando $\varepsilon \to 0$ es decir, una función rectangular infinitamente estrecha y de área unidad.

Más generalmente:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0)}$$

* $\delta(x-x_0)$ es una función “delta” centrada en $x_0$, en lugar de en 0.

# Algunas propiedades de la “delta” de Dirac en 1 D

Aunque matemáticamente no sea una función, no hay problema en usarla porque nosotros físicamente siempre usaremos funciones rectángulo muy estrechas pero de altura finita, que si son rigurosamente funciones aunque las denotaremos como $\delta(x)$

$$\int_a^b f(x)\delta(x-x_0)dx = \begin{cases} f(x_0) & \text{si } a < x_0 < b \\ 0 \ \text{si } x_0 < a \ \text{ o } \ x_0 > b & \end{cases} \quad \text{y} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_0)dx = 1$$

$$(i) \qquad \delta(-x) = \delta(x)$$

$$(ii) \qquad \delta(cx) = \frac{1}{|c|}\delta(x)$$

$\delta(x\text{-}x_0)$ es la derivada de la función “escalón” en $x_0$: $\theta(x\text{-}x_0) = 0$ *si* $x<x_0$, $= 1$ *si* $x>x_0$

# Otras funciones que se aproximan a la “delta” de Dirac

$$i)\ \frac{1}{2\varepsilon}e^{-|x|\varepsilon} \qquad ii)\ \frac{1}{\pi}\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} \qquad iii)\ \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}}e^{-x^2\varepsilon^2} \qquad iv)\ \frac{1}{\pi}\frac{\sin(x/\varepsilon)}{x} \qquad v)\ \frac{\varepsilon}{\pi}\frac{\sin^2(x/\varepsilon)}{x^2}$$

Ejercicio: probar que tienen algunas propiedades de la delta, como las indicadas arriba.

# La $\delta$ de Dirac en 3 D

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)=\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0)$$

En esféricas
$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)=\frac{1}{r^2\sin\theta}\delta(r-r_0)\delta(\theta-\theta_0)\delta(\varphi-\varphi_0)=$$
$$\frac{1}{r^2}\delta(r-r_0)\delta(\cos\theta-\cos\theta_0)\delta(\varphi-\varphi_0)$$

Propiedad fundamental
$$\int_V f(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)d^3r=\begin{array}{ll} f(\boldsymbol{r}_0) & \text{si } \boldsymbol{r}_0 \text{interior a } V \\ 0 & \text{si } \boldsymbol{r}_0 \text{exterior a } V \end{array}$$

$$\nabla^2\left(\frac{1}{r}\right)=4\pi\delta(\boldsymbol{r})$$

# 5. Relación de clausura

*Se trata de un criterio para saber si un conjunto ortonormal es una base del espacio o no lo es.*

*La respuesta es obvia si es de dimensión finita n: debe haber exactamente n funciones linealmente independientes.*

*En un espacio de dimensión infinita no es tan obvio, pero tampoco muy complicado*

Sea $u_j(\mathbf{r})$ un conjunto ortonormal y $\psi(r)$ una función cualquiera del espacio $\mathscr{F}$.

Si $u_j(\mathbf{r})$ es una base podemos elegir unos coeficientes constantes $c_i$ tales que:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r}) = \sum_i (u_i, \psi) u_i(\mathbf{r}) = \sum_i \left[ \int \psi(\mathbf{r}') u_i^*(\mathbf{r}') d^3 r' \right] u_i(\mathbf{r}) =$$

Se puede intercambiar el orden de la suma y la integral.

$$\Psi(\mathbf{r}) = \int \psi(\mathbf{r}') \sum_i \left[ u_i^*(\mathbf{r}') u_i(\mathbf{r}) \right] d^3 r' =$$

Esta igualdad, que debe valer para cualquier función, exige que para ser base el conjunto debe cumplir:

relación de clausura:
$$\boxed{\sum_i u_i^*(\mathbf{r}') u_i(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$$

# 6. "Bases" no pertenecientes a $\mathscr{F}$

*Hay conjuntos de funciones que "funcionan" perfectamente como bases pero no son de cuadrado integrable*

Ejemplo 1: Ondas planas. El teorema de Fourier muestra que cualquier función continua de cuadrado integrable se puede escribir como una superposición de funciones exp(*ipx/ħ*), o sea ondas planas, con todos los valores posibles de $k \equiv p/\hbar$ (aquí *p* es sólo una variable matemática pero introducimos esta notación para su uso posterior en MQ)

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(p) \mathrm{e}^{ipx/\hbar} dp$$

Multiplicando por exp(-*ipx/ħ*), integrando en *x* de se obtiene *g(p)* (es hacer la "transformada de Fourier inversa")

$$g(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \mathrm{e}^{-ipx/\hbar} dx$$

Definiendo las funciones de *x* (una para cada *p*)

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{ipx/\hbar}$$

* Cualquier función se puede escribir como combinación lineal de ellas

Pero las $v_p$ no son de cuadrado integrable: $v_p \notin \mathscr{F}$

Usando la definición de $v_p(x)$ el teorema de Fourier garantiza que:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(p) v_p(x) dp$$

Es decir una "suma" de las funciones de la "base" multiplicada cada una por un coeficiente $g(p)$ *(que hace el papel de cada uno de los* $c_i$ *en el caso de base discreta)*
La "suma" es en realidad una integral porque $p$ toma todo un continuo de valores.

Inversamente, conociendo la función $\Psi$, los "coeficientes" $g(p)$ (se llama transformada de Fourier) se obtienen como:

$$g(p) = \left(v_p, \psi\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} v_p^*(x) \psi(x) dx$$

* La norma de $\psi$ se obtiene de la misma forma que con bases discretas, reemplazando la suma por integral:

$$\|\psi\| = \left(\psi, \psi\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(p)|^2 dp$$

La última igualdad ("de Parseval") es un teorema de las transformadas de Fourier

* Las $v_p(x)$ también verifican la relación de clausura:

Se puede ver que: $$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{iku}\,dk = \delta(u)$$

Para probarlo definir

$$f(u) = \frac{1}{2\pi}\int_{-a}^{a} e^{iku}\,dk = \frac{1}{\pi}\frac{\sin(au)}{u}$$

Y ver que si *a* es muy grande

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(u) f(u)\,du = \psi(0)$$

Entonces:

$$\int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x') v_p(x)\,dp = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')}\,dp = \delta(x-x')$$

Que es la misma anterior reemplazando $\sum_i \to \int_{-\infty}^{\infty} dp$

* Finalmente $v_p(x)$ son ortonormales:

$$\left(v_p, v_{p'}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x) v_{p'}(x)\,dx = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{p-p'}{\hbar}x}\,dx = \delta(p-p')$$

Donde ahora la delta de Kronecker se reemplaza por la de Dirac, con el mismo papel, pero ahora *p* no es un entero sino un número real cualquiera.

Ejemplo 2: Deltas de Dirac. El conjunto de "funciones" $\xi_{r0}(\mathbf{r})=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ centradas en distintos sitios $\mathbf{r}_0$ forma una "base" ortonormal.
$\mathbf{r}$ es la variable 3D indepte y $\mathbf{r}_0$ representa un índice (3 dimensional) continuo que indica a qué función del conjunto nos referimos.

En efecto, para cualquier función $\psi(\mathbf{r})$ se cumple:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int \psi(\mathbf{r}_0)\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)d^3r_0 = \int \psi(\mathbf{r}_0)\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})d^3r_0$$

$\psi(\mathbf{r}_0)$ es un conjunto de números constantes (uno para cada $\mathbf{r}_0$) que hacen el papel de componentes del vector $\psi$ en la base tomada.

También: $$\psi(\mathbf{r}_0) = \int \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)^* \psi(\mathbf{r})d^3r = \int \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\psi(\mathbf{r})d^3r = \left(\xi_{\mathbf{r}_0}, \psi\right)$$

Y cumplen las relaciones de ortonromalización y clausura

$$\left(\xi_{\mathbf{r}_0}, \xi_{\mathbf{r}'_0}\right) = \int \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})^* \xi_{\mathbf{r}'_0}(\mathbf{r})d^3r = \int \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'_0)d^3r = \delta(\mathbf{r}_0-\mathbf{r}'_0)$$

$$\int \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})^* \xi_{\mathbf{r}'_0}(\mathbf{r})d^3r_0 = \int \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'_0)d^3r_0 = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

# “Base ortonormal” continua.

El conjunto de funciones $w_\alpha(\mathbf{r})$ ($\alpha$ toma un continuo de valores o puede ser un vector 3D ) forma una “base ortonormal continua” si cumple:

$$\boxed{\begin{array}{ll} (w_\alpha, w_{\alpha'}) \equiv \int w_\alpha(\mathbf{r})^* w_{\alpha'}(\mathbf{r}) d^3r = \delta(\alpha - \alpha') & \text{Ortonormalización} \\ \int w_\alpha(\mathbf{r})^* w_\alpha(\mathbf{r}') d\alpha = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') & \text{Clausura} \end{array}}$$

Si se cumple esto, cualquier función de onda se puede escribir como “combinación lineal” de las de la base:

En efecto: $$\psi(\mathbf{r}) = \int \psi(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')d^3r' = \int \psi(\mathbf{r}')\left[\int w_\alpha(\mathbf{r})^* w_\alpha(\mathbf{r}')d\alpha\right]d^3r'$$

Invirtiendo la integración en $\alpha$ y en $r'$ *queda :* $$\psi(\mathbf{r}) = \int \left[\int w_\alpha(\mathbf{r}')^* \psi(\mathbf{r}')d^3r'\right] w_\alpha(\mathbf{r})^* d\alpha$$

Lo que quiere decir que *:* $$\psi(\mathbf{r}) = \int w_\alpha(\mathbf{r})^* c(\alpha) d\alpha$$

Con los coeficientes*:* $$\boxed{c(\alpha) = (w_\alpha, \psi) = \int w_\alpha(\mathbf{r}')^* \psi(\mathbf{r}') d^3r'}$$

Que son las componentes de $\psi$ en la base $\{w_a\}$

# Producto escalar en componentes

Dadas dos funciones cualesquiera: $\varphi(\mathbf{r}) = \int w_\alpha(\mathbf{r})^* b(\alpha) d\alpha$

$$\psi(\mathbf{r}) = \int w_\alpha(\mathbf{r})^* c(\alpha) d\alpha$$

El producto escalar: $(\varphi, \psi) = \int \varphi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) d^3 r = \int b(\alpha)^* c(\alpha) d\alpha$

Que tiene la misma forma del producto escalar con bases discretas reemplazando suma por integral en $\alpha$

La norma: $\|\psi\|^2 = (\psi, \psi) = \int c(\alpha)^* c(\alpha) d\alpha = \int |c(\alpha)|^2 d\alpha$

# 7. Espacio de estados $\mathscr{E}$ y notación de Dirac

Veremos más adelante que hay propiedades cuánticas que no pueden tratarse mediante una función de onda y las que sí se puede es cómodo hacerlo de otra forma.

Tomemos como ejemplo preliminar el movimiento de un sólido rígido en MCL. La descripción elemental tradicional sería dar en cada instante la posición de un punto cualquiera del sólido, sin embargo es mucho más simple dar 6 variables $q_i$ ($i$ =1,…6) (llamadas coordenadas generalizadas, por ejemplo la posición del CDM y tres ángulos de Euler que indican la orientación) y de ellas se obtiene la posición de cualquier punto del sólido.

El estado dinámico queda completamente caracterizado dando las 6 coordenadas generalizadas $q_i$ y los6 correspondientes momentos conjugados $p_i$ .

Construimos un espacio abstracto 12D llamado “espacio de las fases”, de modo que un estado posible, dado por 6 valores de las $q_i$ y 6 valores de las $p_i$ es un punto de dicho espacio abstracto.

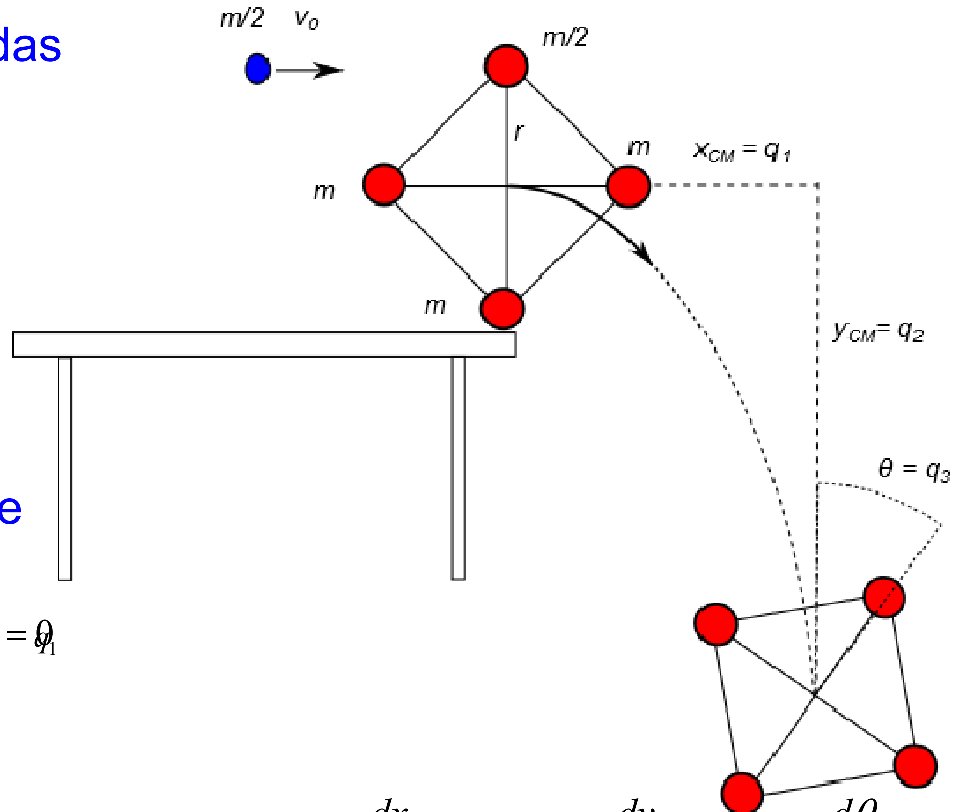
El hamiltoniano $H(p_i,q_i)$, indica las fuerzas que actúan sobre el cuerpo, y determina el movimiento (conociendo el estado inicial) mediante las ecuaciones de Hamilton.

Ejemplo concreto:

Se tiene el sistema rígido de 4 bolas unidas por varillas en equilibrio inestable

Una bala de masa m/2 se incrusta en la bola superior

Describir el movimiento posterior




Solución, choque.

Se conserva P total y L respecto del centro del cuadrado, luego tra el choque el sistema sale con:

$$\frac{m}{2}v_0 = 4mV_{CM0x} \Rightarrow V_{CM0x} \equiv V_{0x} = \frac{1}{8}v_0 \qquad V_{CM0y} \equiv V_{0y} = 0$$

$$\frac{m}{2}v_0 r = I\omega_0 = 4mr^2\omega_0 \Rightarrow \omega_0 = \frac{1}{8}\frac{v_0}{r}$$

Movimiento posterior. Sea: $q_1 \equiv x_{CM}; q_2 \equiv y_{CM}; q_3 \equiv \theta; p_1 = 4m\frac{dx_{CM}}{dt}; p_2 = 4m\frac{dy_{CM}}{dt}; p_3 = I\frac{d\theta}{dt}$

Hamiltoniano: $$\boxed{H = \frac{p_1^2}{8m} + \frac{p_2^2}{8m} + \frac{p_3^2}{2I} - 4mgq_2}$$

Ecs de Hamilton:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

$$\frac{dp_1}{dt} = 0 \Rightarrow p_1 = cte; \quad \frac{dq_1}{dt} = \frac{p_1}{4m} \Rightarrow q_1 = q_{10} + \frac{p_1}{4m}t$$

$$\frac{dp_2}{dt} = -4mg \Rightarrow p_2 = -4mgt; \quad \frac{dq_2}{dt} = \frac{p_2}{4m} = -gt \Rightarrow q_2 = q_{20} - \frac{1}{2}gt^2$$

$$\frac{dp_3}{dt} = 0 \Rightarrow p_3 = cte = I\omega_0; \quad \frac{dq_3}{dt} = \frac{p_3}{I} \Rightarrow q_3 = \frac{p_3}{I}t = \omega_0 t$$

## Coordenadas de las partículas:

$$x_1 = x_{CM} + r\cos\omega_0 t = V_0 t + r\cos\omega_0 t \qquad x_2 = x_{CM} - r\sin\omega_0 t = V_0 t - r\sin\omega_0 t$$

$$y_1 = y_{CM} - r\sin\omega_0 t = -\frac{1}{2}gt^2 - r\sin\omega_0 t \qquad y_2 = y_{CM} - r\cos\omega_0 t = -\frac{1}{2}gt^2 - r\cos\omega_0 t$$

$$x_3 = x_{CM} - r\cos\omega_0 t = V_0 t - r\cos\omega_0 t \qquad x_4 = x_{CM} + r\sin\omega_0 t = V_0 t + r\sin\omega_0 t$$

$$y_3 = y_{CM} + r\sin\omega_0 t = -\frac{1}{2}gt^2 + r\sin\omega_0 t \qquad y_4 = y_{CM} + r\cos\omega_0 t = -\frac{1}{2}gt^2 + r\cos\omega_0 t$$

Notar que:

* Usamos un espacio abstracto 6D ($q_1,q_2,q_3,p_1,p_2,p_3$), “espacio de las fases”
•Cada punto de dicho espacio corresponde a un estado dinámico del sistema completo: un conjunto de coordenadas y velocidades ⇔ un punto del espacio

* Si tenemos el hamiltoniano en función de $q_i$, $p_i$, NO NECESTIAMOS DARLE UN SIGNIFICADO FÍSICO DEL ESPACIO de las fases para resolver el problema, pues nos lo hacen las ecs. de Hamilton.

* Es mucho más simple usar el espacio de las fases que las coordenadas reales de las partículas

* Sólo al final usamos la conexión espacio de las fases- coordenadas reales de las partículas para obtener éstas últimas

# Espacio de estados $\mathscr{E}$ y "kets"

En Mecánica Cuántica recogemos las propiedades del espacio $\mathscr{F}$ de las funciones de onda pero, abriendo la posibilidad a generalizaciones, admitimos que el estado de un sistema cuántico viene representado por un "vector" de un espacio de Hilbert $\mathscr{E}$, que llamamos espacio de estados.

* Un elemento cualquiera de $\mathscr{E}$ se llama un "ket" y se representa mediante el símbolo $|\alpha\rangle$, siendo $\alpha$ un índice que especifica a cuál nos referimos en concreto.

* A cada estado descrito por una función de onda $\psi(r)$ se hace corresponder un ket denominado $|\psi\rangle$, de tal modo que a una combinación lineal de funciones de onda corresponde la misma de kets y el producto escalar de dos funciones es el mismo que el de los kets correspondientes.

* El subespacio $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ que contiene los kets correspondientes a todas las funciones de onda se llama $\mathscr{E}_{\mathbf{r}} \subset \mathscr{E}$.

* Aunque $\mathscr{F}$ y $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ son isomorfos (funcionan exactamente igual) Cohen-Tanoudji *et al.* los distinguen cuidadosamente ("soigneusement" es la palabra empleada). En particular en $|\psi\rangle$ no aparece ya la dependencia de $\psi$ con $\boldsymbol{r}$, ya que puede haber otras representaciones del mismo estado en que $\boldsymbol{r}$ no intervenga.

* Las "reglas del juego" que indican cómo evoluciona un ket con el tiempo dependen del "hamiltoniano" (luego lo veremos).

# 8. Espacio dual $\mathscr{E}^*$ y "bras"

Una funcional lineal es una operación lineal (o "aplicación" en álgebra) que asocia a cada ket un número complejo, unívocamente determinado:

$$\mathscr{E} \xrightarrow{\chi} \mathbb{C}$$

$$|\psi\rangle \to \chi(|\psi\rangle) = \lambda$$

"Lineal" quiere decir que se cumple:

$$\forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathscr{E}, \forall \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C},$$
$$\chi(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 \chi(|\psi_1\rangle) + \lambda_2 \chi(|\psi_2\rangle)$$

El espacio "dual" de $\mathscr{E}$ o espacio $\mathscr{E}^*$ es el conjunto de todas las funcionales lineales en $\mathscr{E}$.

Un elemento cualquiera del "dual" $\mathscr{E}^*$ se representa mediante el símbolo $\langle\chi|$ que se llama un "bra".

El número obtenido al aplicar la funcional $\langle\chi|$ al ket $|\psi\rangle$ se llama "bracket" ("paréntesis" en inglés) y se representa como:

$$\boxed{\langle \chi | \psi \rangle}$$

# Correspondencia "bras"$\leftrightarrow$"kets" (?)

Una importantísima propiedad es que a cada ket $|\varphi\rangle$ le corresponde uno y sólo un bra, simbolizado $\langle\varphi|$ de modo que que el funcional lineal correspondiente obtiene de cualquier ket $|\psi\rangle$ el producto escalar $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$

En efecto, dado un $|\varphi\rangle$ fijo el producto escalar de $|\varphi\rangle$ por otro ket cualquiera es un funcional lineal:

$$\forall|\psi_1\rangle,|\psi_2\rangle \in \mathscr{E}, \forall\lambda_1,\lambda_2 \in \mathbb{C}, \quad \left(|\varphi\rangle, \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle\right) = \lambda_1\left(|\varphi\rangle,|\psi_1\rangle\right) + \lambda_2\left(|\varphi\rangle,|\psi_2\rangle\right)$$

A sí pues el producto escalar de dos kets $|\varphi\rangle$, $|\psi\rangle$ es el valor del bracket:

$$\boxed{\forall|\varphi\rangle,|\psi\rangle \in \mathscr{E} \quad \left(|\varphi\rangle,|\psi\rangle\right) = \langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*}$$

La correspondencia enunciada es "antilineal" (CT dixit, es más común decir "semilineal"), por las propiedades del producto escalar (que es sesquilineal):

$$\left(\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle, |\psi\rangle\right) = \lambda_1^*\left(|\varphi_1\rangle,|\psi\rangle\right) + \lambda_2^*\left(|\varphi_1\rangle,|\psi\rangle\right)$$

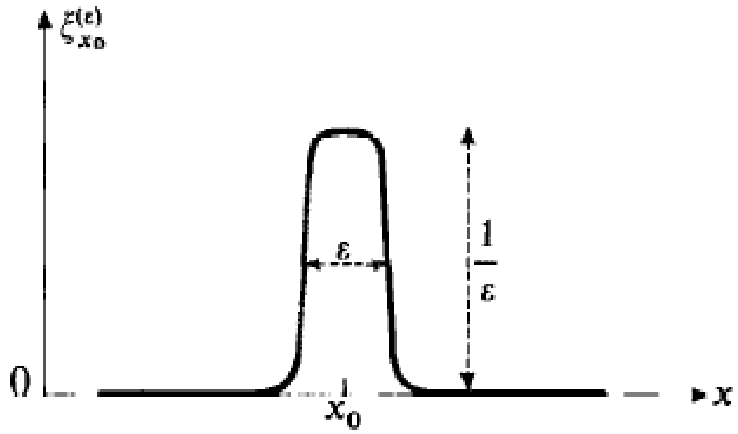
Por lo tanto el bra que corresponde al ket $\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle$ es $\lambda_1^*\langle\varphi_1| + \lambda_2^*\langle\varphi_2|$

# Correspondencia inversa “bras”↔”kets”

A todo bra corresponde un ket solamente si el espacio $\mathscr{E}$ es de dimensión finita

Como contraejemplo consideremos el espacio $\mathscr{F}$ de funciones de cuadrado integrable.

La función real indicada en la figura es (viene representada por) un ket:




Su norma es: $\left\|\xi^{\varepsilon}_{x0}\right\|^2 = \left\langle \xi^{\varepsilon}_{x0} \middle| \xi^{\varepsilon}_{x0} \right\rangle = \left(\xi^{\varepsilon}_{x0}, \xi^{\varepsilon}_{x0}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\xi^{\varepsilon}_{x0}(x)\right|^2 dx = \frac{1}{\varepsilon}$

El bra asociado es $\left\langle \xi^{\varepsilon}_{x0} \middle| \psi \right\rangle = \left(\xi^{\varepsilon}_{x0}, \psi\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \xi^{\varepsilon}_{x0}(x)\psi(x)dx$

Con esa función no hay problema, pero si $\varepsilon \to 0$ la norma se hace infinita por lo tanto no representa ningún ket (la función se hace $\delta(x-x_0)$).

En cambio el producto escalar sigue existiendo: $\left\langle \xi^{\varepsilon}_{x0} \middle| \psi \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \xi^{\varepsilon}_{x0}(x)\psi(x)dx = \psi(x_0)$

Y la funcional lineal correspondiente aplicada a un ket cualquiera $|\psi\rangle$ da el valor de $\psi$ en $x_0$ luego es un bra perfectamente válido.

Aceptaremos “kets generalizados” que sean de norma infinita pero cuyo producto escalar por kets normales da un número finito.

Incluyendo estos “kets generalizados” la correspondencia {bras} $\leftrightarrow$ {kets} es biunívoca.

Físicamente este problema no tiene importancia porque esos estados no corresponden a ningún estado real de un sistema.

Por ejemplo una onda plana (el módulo es constante, luego su cuadrado no es integrable de $-\infty$ a $+\infty$) monocromática representaría una partícula con momento perfectamente definido, y sería infinitamente extensa, lo que nunca va a ocurrir en realidad, pues no podríamos construirla ni con toda la energía del Universo, de la misma forma que no podemos construir un condensador plano de placas infinitas o un solenoide infinitamente largo.

También la función rectangular de anchura $\varepsilon$ y altura $1/\varepsilon$ mencionada antes es de cuadrado perfectamente integrable, pero cuando $\varepsilon$ es mucho menor que las dimensiones físicas del sistema considerado se puede tratar como si fuera $\delta(x-x_0)$

# 9. Operadores lineales en $\mathscr{E}$

Un operador (o “aplicación” o “transfomación”) lineal *A* en el espacio $\mathscr{E}$ es una correspondencia que a todo ket $|\psi\rangle$ del espacio le asocia otro (único) ket $|\psi'\rangle \equiv A\,|\psi\rangle$ , y tal que

$$\forall|\psi_1\rangle,|\psi_2\rangle \in \mathscr{E}\ ,\forall\lambda_1,\lambda_2 \in \mathbb{C},\ A\big(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle\big)=\lambda_1 A|\psi_1\rangle+\lambda_2 A|\psi_2\rangle$$

Aunque es una operación matemática, se puede ver *A* como algo que “actúa” sobre un ket $|\psi\rangle$ y como resultado produce, o lo transforma en otro $|\psi'\rangle$

Se define el producto de dos operadores *A* y *B* como un tercer operador *C*=*AB* que equivale a aplicar primero *B* y después *A*, en ese orden preciso

$$AB|\psi\rangle \equiv A\big(B|\psi\rangle\big)$$

Como propiedad fundamental el producto de dos operadores no siempre es conmutativo.

$$[A,B]\equiv AB-BA$$

Dados dos kets $|\varphi\rangle$ y $|\psi\rangle$ elemento de matriz de *A* entre $|\varphi\rangle$ y $|\psi\rangle$ es el (número complejo) producto escalar entre $|\varphi\rangle$ y $A|\psi\rangle$

$$\langle\varphi|\big(A|\psi\rangle\big)$$

# Proyectores

* Si $|\varphi\rangle$ y $|\psi\rangle$ son dos kets dados la expresión $|\psi\rangle\langle\varphi|$ representa un operador lineal cuya actuación sobre un tercer ket $|\chi\rangle$ se define intuitivamente: el producto escalar del segundo por el tercer ket da un número que se multiplica por el primero

$$\left(|\psi\rangle\langle\varphi|\right)|\chi\rangle \equiv |\psi\rangle\langle\varphi|\chi\rangle$$

* Dado un ket $|\psi\rangle$ de norma unidad (o sea $\langle\psi|\psi\rangle=1$ ) el operador $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ se llama proyector sobre $|\psi\rangle$ , y obtiene la proyección ortogonal de cualquier ket sobre la dirección de $|\psi\rangle$

$$P_\psi|\chi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle|\psi\rangle$$

Como ejemplo, en el espacio 3D ordinario y con el producto escalar de vectores habitual, dado un vector unitario ***u*** y otro vector cualquiera ***v***, $P_{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{v} = |\boldsymbol{v}|\cos\theta\,\boldsymbol{u}$, donde $\theta$ es el ángulo que forman

* Una propiedad de todo proyector es que es autoadjunto (ver más adelante) e idempotente: $P_\psi^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle 1\langle\psi| = P_\psi$

# Proyector sobre un subespacio

Dado un conjunto de vectores ortonormales, $\{|\varphi_j\rangle, j = 1,2,\ldots,q\}$, el conjunto de todas las combinaciones lineales de ellos $\mathscr{E}_q$ se llama un subespacio de $\mathscr{E}$,

$$\mathscr{E}_q \subset \mathscr{E}.$$

El operador: $P_q = \sum_{j=1}^{q} |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|$

Se llama proyector sobre $\mathscr{E}_q$ y a partir de un ket cualquiera $|\chi\rangle \in \mathscr{E}$ obtiene otro ket que pertenece al subespacio $\mathscr{E}_q$ y que se llama proyección ortogonal de $|\chi\rangle$ sobre $\mathscr{E}_q$

# Acción de un operador sobre un bra

Vamos a definir la actuación de $A$ sobre un bra $\langle\varphi|$ y lo vamos a simbolizar
$\langle\varphi'| = \langle\varphi|A$ *(escrito $A$ a la derecha de $\langle\varphi|$ )*
como el bra $\langle\varphi'|$ que, multiplicado escalarmente por un ket cualquiera $|\psi\rangle$ ,
obtiene el mismo número que multiplicando escalarmente $\langle\varphi|$ *por* $A\,|\psi\rangle$

Según la definición, el resultado es el mismo tanto si el $A$ se aplica a $|\psi\rangle$ y luego se hace el producto escalar como si primero $A$ actúa sobre $\langle\varphi|$ y luego se hace el producto escalar.

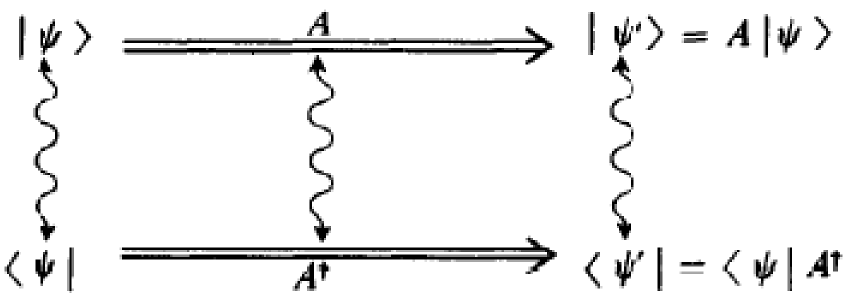
Así pues el elemento de matriz de de $A$ entre $|\varphi\rangle$ y $|\psi\rangle$ se escribe:

$$\boxed{\langle\varphi|A|\psi\rangle}$$

# Operador $A^+$: hermítico conjugado o "adjunto" de $A$

La definición es más simple mediante el gráfico de la derecha:

1) A un $|\psi\rangle$ corresponde un único bra $\langle\psi|$
2) Si actuamos sobre $|\psi\rangle$ mediante un operador lineal obtenemos otro $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$
3) A este $|\psi'\rangle$ le corresponde otro bra $\langle\psi'|$




Entonces definimos como $A^+$ el operador que actuando sobre $\langle\psi|$ produce el mismo $\langle\psi'|$.

* Un operador se llama hermítico o "autoadjunto" si es igual a su hermítico conjugado

$$A^+ = A$$

La matriz representativa es la conjugada de su transpuesta

Ejemplo: todo proyector es hermítico

# Propiedades

* La propiedad principal es que dados dos kets (o bras) $|\varphi\rangle$ y $|\psi\rangle$ cualesquiera

$$\langle\varphi|A^+|\psi\rangle = \langle\psi|A|\varphi\rangle^*$$

* Si un conjunto $\{|\psi_i\rangle\}$ forma una base, los elementos de matriz entre vectores de la base $|\psi_i\rangle$ y $|\psi_j\rangle$ forman una matriz cuadrada

$$A_{ij} = \langle\psi_i|A|\psi_j\rangle$$

* La conjugación hermítica da la matriz conjugada y transpuesta

$$A^+_{ij} = A^*_{ji}$$

* El conjugado hermítico de un producto de operadores es el producto de los conjugados, en orden inverso

$$(AB)^+ = B^+A^+$$

$$(ABC)^+ = (BC)^+A^+ = C^+B^+A^+$$

* Notación de Dirac $\left(|u\rangle\langle v|\right)^+ = |v\rangle\langle u|$

* **RULE**

To obtain the Hermitian conjugate (or the adjoint) of any expression composed of constants, kets, bras and operators, one must :

– *Replace*
  - the constants by their complex conjugates
  - the kets by the bras associated with them
  - the bras by the kets associated with them
  - the operators by their adjoints

– *Reverse the order* of the factors (the position of the constants, nevertheless, is of no importance).

# 10. “Representaciones”

Consideremos el espacio de estados $\mathscr{E}$ y una base ortonormal, discreta $\{|u_j\rangle\}$ o continua $\{|w_\alpha\rangle\}$

Recordemos que eso quiere decir que se cumplen 2 condiciones: i) ortonormalización y ii) clausura

$$i) \quad \langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij} \quad \text{o bien:} \quad \langle w_\alpha | w_\beta \rangle = \delta(\beta - \alpha)$$

Con la definición de los proyectores la relación de clausura se puede expresar diciendo que se cumple:

$$ii) \quad P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1} \quad \text{o bien:} \quad P_{\{w_\alpha\}} = \int d\alpha \, |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| = \mathbb{1}$$

Donde $\mathbb{1}$ es el, operador unidad o identidad, que aplicado a cualquier ket obtiene el mismo ket: $\mathbb{1}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$.

Ejercicio: probar que si se cumplen i) y ii) cualquier ket $|\psi\rangle$ se puede escribir como combinación lineal de los , $\{|u_j\rangle\}$ y los coefecientes son los productos escalares de cada $\{|u_j\rangle$ con $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad \text{o bien:} \; |\psi\rangle = \int d\alpha \, |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\psi\rangle = \int d\alpha \, c(\alpha) |w_\alpha\rangle$$

Esta última propiedad

$$|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \qquad \text{o bien} : |\psi\rangle = \int d\alpha\, |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\psi\rangle = \int d\alpha\, c(\alpha)\, |w_\alpha\rangle$$

Dada una base, cualquier ket $|\psi\rangle$ queda determinado biunívocamente por el conjunto (ordenado) de coeficientes $c_i$ o $c(\alpha)$, que son las "componentes" del vector en la base. Se dice que ese conjunto es una "representación" del ket $|\psi\rangle$

Un ket $|\psi\rangle$ queda representado por el "vector columna" (pero de infinitas filas, o incluso un continuo de filas)

$$\begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle u_i|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{c} \\ \alpha \downarrow \\ \\ \end{array} \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle w_\alpha|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

# Representación de los bras

De la propiedad $P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1}$ o bien: $P_{\{w_\alpha\}} = \int d\alpha |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| = \mathbb{1}$

Podemos escribir un bra cualquiera $\langle\varphi|$ como:

$$\langle\varphi| = \langle\varphi|\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \sum_i \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i| \quad \text{o bien:} \quad \langle\varphi| = \int \langle\varphi|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|$$

Entonces un bra cualquiera $\langle\varphi|$ queda representado por el vector fila:

$(\langle\varphi|u_1\rangle \quad \langle\varphi|u_2\rangle \ldots\ldots \langle\varphi|u_i\rangle \ldots\ldots)$ $\qquad (\ldots\ldots\ldots\ldots \langle\varphi|w_\alpha\rangle \ldots\ldots\ldots\ldots)$

$\alpha$

El producto escalar de dos kets (o el producto de un bra por un ket) $\langle\varphi|$ en componentes es como el producto escalar ordinario, pero cojugando las componentes del primero:

$$\boxed{|\varphi\rangle = \sum_i b_i |u_i\rangle, |\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \Rightarrow \langle\varphi|\psi\rangle = \sum_i b_i^* c_i = \sum_{ij} b_i^* c_j \delta_{ij}}$$

O bien $|\varphi\rangle = \int d\alpha b(\alpha)|w_\alpha\rangle \quad , |\psi\rangle = \int d\alpha c(\alpha)|w_\alpha\rangle \Rightarrow \langle\varphi|\psi\rangle = \int b(\alpha)^* c(\alpha) d\alpha$

# Representación de los operadores lineales

Dado un operador lineal *A* y una base ortonormal $\{|u_j\rangle\}$ o $\{|w_\alpha\rangle\}$, el operador queda completamente determinado por su actuación sobre los kets de la base.

* Si llamamos $A_{ij}$ la componente *i* del vector obtenido al actuar *A* sobre $|u_j\rangle$, se tiene

$$\boxed{A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle}$$

*Si $\quad |\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad$ y $\quad |\psi'\rangle \equiv A|\psi'\rangle = \sum_i c'_i |u_i\rangle$

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_i \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \end{pmatrix}$$

*El operador hermítico conjugado queda representado por la matriz transpuesta y conjugada

$$\boxed{\left(A^+\right)_{ij} = A^*_{ji}}$$