Métodos Matemáticos II - Grado en Física
Notación de Dirac
Curso 2013-2014

Carlos Fernández González

Departamento de Física de los Materiales - UNED

Introducción

En el tema 6 del curso hemos introducido la estructura de espacio de Hilbert, con un producto escalar $\langle \cdot, \cdot \rangle$ lineal en la primera variable y antilineal en la segunda, que inducía la norma del espacio.

Sin embargo, en muchos sentidos es más natural introducirlo de manera que sea lineal en la segunda variable y antilineal en la primera. Esto da una forma muy fácil de manejar un espacio de Hilbert y su dual, de escribir las proyecciones, los productos escalares, de descomponer los operadores, etc.

Estas notas están dedicadas a ver brevemente la equivalencia entre las dos convenciones y la utilidad de la segunda, y la introducción de una notación muy usada en Física e introducida por Dirac.

Además, pretenden aclarar las diferencias de notación entre el libro base de la asignatura, *Introductory Functional Analysis with Applicacions*, de E. Kreyszig, y uno de los libros recomendados en la bibliografía complementaria, *Introducción al Formalismo de la Mecánica Cuántica*, de P. García, J. E. Alvarellos y J. J. García. Además de lo expuesto en estas notas, este segundo libro denota la conjugación compleja con un asterisco – z^* en lugar de $\bar{z}$ – siguiendo la línea en que se denota la aplicación adjunta de una dada. En el libro de García, Alvarellos y García podéis encontrar también la notación de Dirac en la sección 2.18.

1. Dos productos escalares.

En el tema 6 introdujimos el producto escalar en un espacio vectorial H como una aplicación

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : H \times H \longrightarrow \mathbb{C}$$

con las siguientes propiedades:

- linealidad en la primera variable,

$$\langle ax_1 + bx_2, y\rangle = a\langle x_1, y\rangle + b\langle x_2, y\rangle, \ \forall x, y \in H, \ \forall a, b \in \mathbb{C};$$

- antilinealidad en la segunda variable,

$$\langle x, ay_1 + by_2\rangle = \bar{a}\langle x, y_1\rangle + \bar{b}\langle x, y_2\rangle, \ \forall x, y \in H, \ \forall a, b \in \mathbb{C};$$

- positiva[1] en la diagonal, $\langle x, x\rangle \geq 0, \ \forall x \in H$;
- y que, dentro de la diagonal, se anula sólo para el vector 0,

$$\langle x, x\rangle = 0 \iff x = 0.$$

A este tipo de producto escalar lo llamaremos en este capítulo producto escalar de tipo M, o M-producto escalar[2], recordando que es el producto escalar que se suele usar en textos de Matemáticas.

Introduzcamos ahora el producto escalar que se suele usar en Física.

Definición 1.1. Dado un espacio vectorial H, llamaremos **producto escalar de tipo F** o **F-producto escalar** a una aplicación

$$\langle \cdot | \cdot \rangle : H \times H \longrightarrow \mathbb{C}$$

con las siguientes propiedades:

- antilinealidad en la primera variable,

$$\langle ax_1 + bx_2 \,|\, y\rangle = \bar{a}\langle x_1 \,|\, y\rangle + \bar{b}\langle x_2 \,|\, y\rangle, \ \forall x, y \in H, \ \forall a, b \in \mathbb{C};$$

- linealidad en la segunda variable,

$$\langle x \,|\, ay_1 + by_2\rangle = a\langle x \,|\, y_1\rangle + b\langle x \,|\, y_2\rangle, \ \forall x, y \in H, \ \forall a, b \in \mathbb{C};$$

- positiva en la diagonal, $\langle x \,|\, x\rangle \geq 0, \ \forall x \in H$;
- y que, dentro de la diagonal, se anula sólo para el vector 0,

$$\langle x \,|\, x\rangle = 0 \iff x = 0.$$

[1] En este contexto un número complejo z se dice positivo si $z = x + 0i$, para algún $x \in \mathbb{R}^+$, incluyendo el 0.

[2] Esta nomenclatura y la de F-producto escalar no son estándar. Normalmente cualquier texto escoge una de las dos formas de producto escalar, y establece todos los resultados de forma consistente con la convención escogida.

EJERCICIO 1.2. Dado un M-producto escalar $\langle\cdot,\cdot\rangle$, demostrar que

$$\langle\cdot\,|\,\cdot\rangle : H \times H \longrightarrow \mathbb{C}$$

definido como $\langle x\,|\,y\rangle := \overline{\langle x, y\rangle} = \langle y, x\rangle$ es un F-producto escalar.

El resultado inverso también es cierto, el conjugado de un F-producto escalar es un M-producto escalar.

Llamaremos **asociados**[3] a estos F-productos y M-productos escalares.

Como consecuencia, los F-productos escalares también nos permiten inducir normas en los espacios.

COROLARIO 1.3. *Sea H un espacio de Hilbert dotado de un F-producto escalar $\langle\cdot\,|\,\cdot\rangle$. Entonces*

$$\|\cdot\|_{\langle\cdot\,|\,\cdot\rangle} : H \longrightarrow \mathbb{R}$$

definido como $\|x\| = \langle x\,|\,x\rangle$ es una norma. Mas aún, coincide con la norma inducida por el M-producto escalar asociado a $\langle\cdot\,|\,\cdot\rangle$.

DEMOSTRACIÓN. Sea $\langle\cdot,\cdot\rangle = \langle\cdot\,|\,\cdot\rangle$ el M-producto escalar asociado a $\langle\cdot\,|\,\cdot\rangle$. Tenemos que

$$\|x\|_{\langle\cdot\,|\,\cdot\rangle} = \langle x\,|\,x\rangle = \overline{\langle x, x\rangle} = \langle x, x\rangle = \|x\|_{\langle\cdot,\cdot\rangle}, \;\; \forall x \in H.$$

Por tanto, la apliación del enunciado es exactamente la norma asociada al M-producto escalar $\langle\cdot,\cdot\rangle$. $\square$

Consecuentemente, las estructuras de espacio de Hilbert inducida en H por un M-producto escalar y un F-producto escalar asociados son exactamente la misma.

Todos los resultados vistos que implican normas son válidos en sus enunciados originales. Sin embargo, aquellos que involucren productos escalares necesitarán ser ligeramente adaptados.

EJERCICIO 1.4. Enunciar una versión del Teorema de Representación de Riesz adaptada a F-productos escalares.

[3] Esta nomenclatura tampoco es estándar, por el motivo por el que no lo eran los nombres M-producto escalar y F-producto escalar.

2. Dualidad y notación de Dirac

Empecemos recordando las nociones de espacio dual (topológico) y vector dual en espacios de Hilbert y el Teorema de Representación de Riesz, visto en el último ejercicio de la anterior sección.

Definición 2.1. Dado un espacio de Hilbert H, su **espacio dual** H^* es el conjunto de funcionales lineales acotados

$$f : H \longrightarrow \mathbb{C}.$$

Definición 2.2. Dado un vector $x \in H$, llamaremos **vector dual** de x al funcional

$$x^* : H \longrightarrow \mathbb{C},\ x^*(y) = \langle y, x \rangle.$$

Recordemos que $x^* \in H^*,\ \forall x \in H$.

Teorema 2.3 (Teorema de Representación de Riesz - versión funcionales). *Dado un espacio de Hilbert H y un funcional lineal acotado $f \in H^*$, existe un único elemento $x \in H$ tal que $f = x^*$. Ademas, $\|f\| = \|x\|$.*

En la definición de vector dual, si tomamos el F-producto escalar asociado al M-producto escalar del enunciado, tenemos que

$$x^*(y) = \langle x \,|\, y \rangle.$$

Por tanto, podemos escribir $x^*(\cdot) = \langle x \,|\, \cdot \rangle$.

De este modo, la primera entrada queda como 'reservada a un elemento del dual' que actúa naturalmente en el segundo, recordando el orden que se da habitualmente a las funciones aplicadas sobre vectores, de la forma $f(x)$. Es en este sentido en que es más natural tomar como producto escalar los F-productos escalares en lugar de los M-productos escalares.

La convención de tomar F-productos escalares da lugar a una notación muy cómoda, introducida por Dirac. Los vectores serán denotados de la forma $x =: |x\rangle$, y serán llamados ***kets***. Los vectores duales serán denotados por $x^* =: \langle x|$, y serán llamados ***bras***. De este modo, un dual actuando sobre un vector se traduce inmediatamente en el producto escalar 'gráficamente´:

$$\langle y, x \rangle = x^*(y) = \langle x \,|(|\, y \rangle) \overset{(!)}{=} \langle x \,\|\, y \rangle = \langle x \,|\, y \rangle.$$

En (!) simplemente hemos prescindido del paréntesis, igual que lo hacemos a veces con operadores al escribir $A(v)$ o Av indistintamente. Por tanto, la regla de cálculo que tenemos queda

$$\langle x \,\|\, y \rangle = \langle x \,|\, y \rangle.$$

Esta última notación será llamada ***braket***; de ahí vienen los anteriores nombres *bra* y *ket*. La notación $\langle x \,\|\, y\rangle$ no se usa nunca.

Nótese una diferencia fundamental entre los *bras* y los *kets*:

$$|\, ax\rangle = a|\, x\rangle,\;\; \langle ax\,| = \bar{a}\langle x\,|,$$

ya que $(ax)^* = \bar{a}x^*$.

En el caso de que haya un operador A actuando en el espacio de Hilbert, tendríamos

$$\langle x\,|\, Ay\rangle = \langle x\,|A|\, y\rangle = \langle A^* x\,|\, y\rangle,$$

como sabemos de la definición de operador adjunto.

Esta notación es también muy útil para describir las proyecciones. Una proyección sobre un espacio unidimensional generado por un vector unitario u es la aplicación $x \mapsto u^*(x)u = \langle x, u\rangle$. Con la notación de Dirac tendríamos

$$|\, x\rangle \mapsto |\, u\rangle\langle u \,\|\, x\rangle = |\, u\rangle\langle u\,|\, x\rangle = \langle u\,|\, x\rangle|\, u\rangle.$$

Así, la proyección estaría denotada por $|\, u\rangle\langle u\,|$, dejando el vector dual en segundo lugar listo para ser aplicado al vector sobre el que vaya a actuar.

Para expresar la proyección sobre un subespacio de dimensión 1 hemos elegido un vector unitario de él, pero esta expresión no depende del vector elegido. Si tenemos otro vector unitario $|\, v\rangle$ generando el mismo subespacio, éste y el anterior serían linealmente independientes, y por tanto tendríamos que $|\, v\rangle = e^{i\phi}|\, u\rangle = |\, e^{i\phi}u\rangle$ para cierto $\phi \in \mathbb{R}$ (podríamos elegir $\phi \in [0, 2\pi),$). Entonces tendríamos que

$$|\, v\rangle\langle v\,| = |\, e^{i\phi}u\rangle\langle e^{i\phi}u\,| = e^{-i\phi}|\, u\rangle(e^{i\phi}\langle u\,|) = e^{-i\phi}e^{i\phi}|\, u\rangle\langle u\,| = |\, u\rangle\langle u\,|.$$

Si tenemos un subespacio n-dimensional F y una base ortonormal de el $\{x_1, \ldots, x_n\}$, la proyección sobre él sería

$$\Pi_F = \sum_{i=1}^{n} |\, x_i\rangle\langle x_i\,|.$$

Asimismo, si tenemos una base de todo el espacio y una base ortonormal $\{x_i\}_i$ de él, el operador identidad se puede expresar como

$$\mathbb{I} = \sum_i |\, x_i\rangle\langle x_i\,|,$$

que al ser aplicado a un vector cualquiera x da lugar a una versión equivalente de la fórmula

$$x = \sum_i \langle x, x_i\rangle x_i.$$

3. Cálculos matriciales.

La notación de Dirac también se adapta perfectamente a la forma de calcular con vectores y matrices.

Así, si consideramos los *kets* como vectores columna y los *bras* como vectores fila, en espacios finitodimensionales tenemos que

$$\langle x \,|\, y \rangle = \begin{pmatrix} \overline{x_1} & \overline{x_2} & \cdots & \overline{x_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{n} \overline{x_i} y_i.$$

También es útil para recordar cómo se calculan las proyecciones. Si, por ejemplo, consideramos la proyección sobre el espacio generado por $x = (i, 0, 0)$, ésta sera

$$\Pi_{\mathrm{span}\{x\}} = |\, x \rangle \langle x \,| = \begin{pmatrix} i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = |\, e_1 \rangle \langle e_1 \,|.$$

Ejercicio 3.1. Calcular $\sum_{i=1}^{3} |\, x_i \rangle \langle x_i \,|$, donde $\{x_i\}_{i=1}^{3}$ es la base que resulta de ortonormalizar la base $\{(1,1,0), (1,0,1), (0,1,1)\}$.

Con vectores y matrices infinitos también se puede hacer algunos de estos cálculos, aunque en algunos casos hay que tener cuidado para garantizar la convergencia, o a la hora de permutar límites, etc.

4. Los escalares como aplicaciones lineales sobre $\mathbb{C}$ y la notación de la conjugación compleja.

El conjunto de los números complejos $\mathbb{C}$ puede ser considerado como un espacio vectorial complejo de dimensión 1, dotado del M-producto escalar $\langle z_1, z_2 \rangle = \bar{z}_1 z_2$. Visto como tal, todas las aplicaciones lineales en $\mathbb{C}$ tienen la forma $z \mapsto \alpha z$, para algún $\alpha \in \mathbb{C}$.

Si llamamos f_α a la aplicación $f_\alpha(z) = \alpha z$, tenemos que la aplicación adjunta f_α^* resulta ser $f_{\bar{\alpha}}$, ya que

$$\langle z_1, \alpha z_2 \rangle = \alpha \langle z_1, z_2 \rangle = \langle \bar{\alpha} z_1, z_2 \rangle.$$

En este sentido, si identificamos α con f_α y vemos al escalar como un funcional, es natural identificar las notaciones $\alpha^* = \bar{\alpha}$.

Esta identificación se usa a lo largo de todo el libro *Introducción al Formalismo de la Mecánica Cuántica*, de P. García, J. E. Alvarellos y J. J. García, recomendado en la bibliografía complementaria de la asignatura como apoyo al curso.