

PRODUCTO ESCALAR

El **producto escalar** de dos vectores ψ_i y ψ_j se expresa como

$$\langle \psi_i, \psi_j \rangle = \langle i/j \rangle = \alpha$$

donde α es un número que depende del espacio común a ambas funciones o vectores en términos de una base dada, también común.

El *producto escalar* de dos vectores $\langle \psi_i, \psi_j \rangle$ es una función tal que cumple las propiedades siguientes:

1. $\langle i/j \rangle = \langle j/i \rangle \Rightarrow$ es conmutativo
2. $\langle i/\beta j \rangle = \beta \langle i/j \rangle \Rightarrow$ es asociativo u homogéneo con respecto a la multiplicación de vectores por un número real (escalar).
3. $\langle \langle i/ + \langle j/ |k \rangle \rangle = \langle i/k \rangle + \langle j/k \rangle \Rightarrow$ es distributivo
4. $\langle i/j \rangle \geq 0 \Rightarrow$ es positivo
5. $\langle i/j \rangle = 0 \Rightarrow |i\rangle = \mathbf{0}$ o no singular para cualquier valor de ψ_j .

Un espacio vectorial cuyos productos escalares cumplen con estas condiciones se denominan **espacio euclídeo**.

La **norma** o **módulo** de un vector o función se define como:

$$|\psi_i| = \langle i/i \rangle^{1/2}$$

Un vector es **unitario** o está **normalizado** cuando $|\psi_i| = 1$

Dos vectores son **ortogonales** cuando su producto escalar es nulo.

$$\langle i/j \rangle = 0$$

o lo que es lo mismo, el uno carece de proyección sobre el otro y por lo tanto no ocupan espacios comunes.

Una base de vectores funciones se llama **ortonormal** si:

$$\langle i/j \rangle = \delta_{ij}$$

donde δ_{ij} es la "**delta de Kroneker**" tal que:

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= 0 \text{ si: } i \neq j \\ &= 1 \text{ si: } i = j . \end{aligned}$$

Como producto de lo anterior un estado se puede expresar en términos de funciones ortonormales que sean base del espacio a que se refiera.

Como ejemplo, una molécula puede ser tomada como un espacio con tantas dimensiones como orbitales atómicos la componen. Las funciones que definen tales orbitales atómicos pueden considerarse, con aproximaciones, como una base ortonormal de tal espacio y por consiguiente los estados de la molécula podrán expresarse como combinaciones lineales de tales orbitales atómicos ortonormales.

En un espacio P de funciones en q y en el subespacio C de funciones continuas sobre el segmento $[a,b]$ de valores de las coordenadas q , el producto escalar se define y opera como:

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

que cumple las condiciones descritas anteriormente. Así:

$$\|\psi_i(q)\|^2 = \int_a^b \psi_i(q)^2 dq = 1$$

si la función $\psi(q)_i$ está normalizada.