

TFYA35 Molekylfysik
Föreläsning 4 - Bra-ket-notation

Thomas Ederth
Linköpings universitet
IFM

Diracs "bracket"-notation (bra-ket-notation)

Detta är ett förenklat skrivsätt för vågfunktioner och integraler; där en "bra" är första vågfunktionen i en integral: $\langle \cdot |$, och en "ket" är den andra: $|\cdot\rangle$, och där komplexkonjugatet på den första är underförstått:

$$\psi^* \rightarrow \langle \psi | \quad \text{och} \quad \psi \rightarrow |\psi\rangle$$

Om a är ett komplext tal gäller:

$$\langle a\psi | = a^* \langle \psi | \quad \text{och} \quad |a\psi\rangle = a |\psi\rangle$$

Dessa sätts ihop på följande vis:

$$\int_V \psi_n^* \psi_m d\tau = \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \langle n | m \rangle$$
$$\langle \Omega \rangle = \int_V \psi_n^* \hat{\Omega} \psi_n d\tau = \langle \psi_n | \hat{\Omega} | \psi_n \rangle = \langle n | \hat{\Omega} | n \rangle$$
$$\hat{\Omega} \psi_n = \hat{\Omega} |\psi_n\rangle = \hat{\Omega} |n\rangle$$
$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle^* = \langle \psi_m | \psi_n \rangle$$

Villkoret för att en operator $\hat{\Omega}$ är Hermitsk kan då t.ex. skrivas som

$$\langle n|\hat{\Omega}|m\rangle = \langle m|\hat{\Omega}|n\rangle^*$$

För en vågfunktion med kvanttalen n, l, m skrivs $\psi_{nlm} = |nlm\rangle$. För ett givet huvudkvanttal n skrivs ett s -tillstånd $|n00\rangle$ (eftersom $l = m_l = 0$), ett p -tillstånd har 3 orbitaler $|n1m\rangle$ med $m = -1, 0, 1$, och ett d -tillstånd har 5 orbitaler $|n2m\rangle$ med $m = -2, -1, 0, 1, 2$.

Spinn-vågfunktionerna kan skrivas $|\frac{1}{2}, m_s\rangle$, med $m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Dirac-notation är vanligt förekommande i kvantmekanik-litteraturen, och kännedom om denna nomenklatur förenklar både skrivsätt och läsning betydligt!