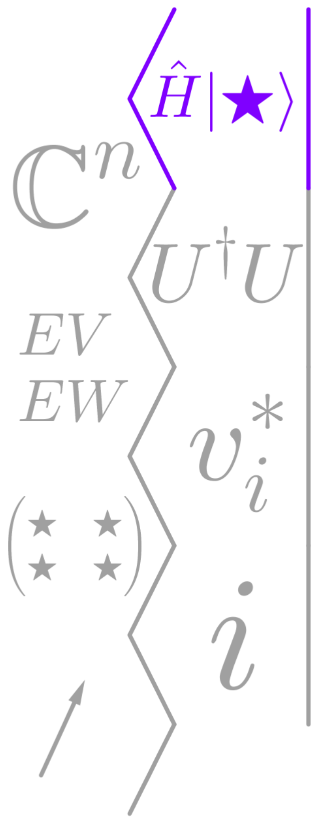
Bra-Ket-Formalismus

18. März 2019



Hier befassen wir uns mir den Grundzügen des in der Quantenmechanik verwendeten Formalismus, der auf Paul Dirac zurückgeht. Dieser bietet den Vorteil, dass er darstellungsunabhängig ist.

Michaela Miedler

Einstiegsbeispiele

Da sich dieser Baustein mit einem neuen Formalismus beschäftigen wird, sind hier keine Einstiegsbeispiele gegeben. Anstelle dieser soll kurz auf die Geschichte des Bra-Ket-Formalismus oder Dirac-Formalismus eingegangen werden.

Der Bra-Ket-Formalismus wurde im Jahr 1939 von Paul Dirac eingeführt, weshalb er auch den Namen „Dirac-Formalismus" trägt. Er ähnelt dabei der bereits 100 Jahre älteren Schreibweise für das innere Produkt, die auf Hermann Grassmann zurückgeht[1]. Dirac spricht in seinem Artikel an, dass ein guter Formalismus dabei helfen soll wichtige Zusammenhänge einfach anschreiben zu können[2]:

> In mathematical theories the question of notation, while not of primary importance, is yet worthy of careful consideration, since a good notation can be of great value in helping the development of a theory, by making it easy to write down those quantities or combinations of quantities that are important, and difficult or impossible to write down those that are unimportant. The summation convention in tensor analysis is an example, illustrating how specially appropriate a notation can be.

Sie sehen auch, dass ein Vergleich zur Summenkonvention gezogen wird, die wir im Baustein „Komplexe Zahlen und Indexnotation" kennengelernt haben. Dirac endet seinen Artikel indem er zwei wichtige Eigenschaften dieses Formalismus anspricht:

> Two general rules in connexion with the new notation may be noted, namely, any quantity in brackets $\langle\ \rangle$ is a number, and any expression containing an unclosed bracket symbol $\langle$ or $\rangle$ is a vector in Hilbert space, of the nature of a ϕ or ψ respectively. As names for the new symbols $\langle$ and $\rangle$ to be used in speech, I suggest the words bra and ket respectively.

In diesem Absatz spricht er bereits die Namen der beiden verwendeten Klammern (englisch **bra**c**ket**) an.

[1] `https://en.wikipedia.org/wiki/Bra\%E2\%80\%93ket_notation` (25.02.2019)

[2] P. A. M. Dirac (1939). A new notation for quantum mechanics. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 35, pp 416-418 doi:10.1017/ S0305004100021162

1 Auf der Suche nach Unabhängigkeit - I've been looking for freedom

In der Motivation wurde bereits angesprochen, dass der Bra-Ket-Formalismus einen klaren Vorteil im Vergleich zur Vektorschreibweise von Zuständen bietet. Wir wollen nun anhand eines Beispiels verdeutlichen, welche Vereinfachung wir dabei meinen.

Wir haben bereits darüber gesprochen, dass wir Wahrscheinlichkeiten über das Skalarprodukt berechnen wollen. Diese Rechnungen können relativ lang werden, weshalb es oft einfacher sein wird, wenn wir Ausdrücke zuerst ganz allgemein berechnen und erst am Schluss konkrete Werte einsetzen. Es ist klar, dass Resultate in der Physik nicht von der Wahl des Koordinatensystems abhängen dürfen. Aus der klassischen Mechanik kennen wir bereits die verallgemeinerten Koordinaten. Erst wenn wir ein konkretes Problem betrachten, machen wir uns Gedanken darüber, welches Koordinatensystem nun für unsere Betrachtung sinnvoll ist. Die Suche nach einer möglichst allgemeinen Beschreibung ist somit nichts Neues für uns.

In diesem Baustein wollen wir nun der Frage nachgehen, ob das auch für Zustandsvektoren möglich ist. Können wir die Berechnungen, die wir in der Quantenmechanik anstellen wollen auch mit allgemeineren Objekten als ganz konkreten Vektoren, die wir in den vorherigen Bausteinen kennengelernt haben, durchführen?

2 Der Formalismus am Beispiel der zweidimensionalen Vektoren

Bei der Betrachtung von Vektoren sind wir immer von einer Orthonormalbasis ausgegangen. Beispielsweise die Standardbasis

$$B = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

oder die um 45° zu ihr gedrehte Basis

$$B = \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \right\}$$

Zweitere erhält man durch anwenden der Rotationsmatrix auf die Vektoren der Standardbasis. In welcher Basis wir rechnen sollte egal sein, denn es geht meist nur um die Messergebnisse, die nicht von der konkreten Basiswahl abhängen. Einige wichtige Eigenschaften der Standardbasis müssen jedoch übernommen werden.

1. Wir benötigen für den zweidimensionalen Raum zwei linear unabhängige Basisvektoren.

2. Alle Vektoren des zweidimensionalen Raums sollen aus den Basiszuständen durch Linearkombinationen gebildet werden können.

3. Alle Basisvektoren sollen normiert sein.

4. Die Basisvektoren sollen aufeinander normal stehen.

Die räumliche Veranschaulichung der Vektoren wäre zwar möglich, jedoch wollen wir ihr hier weniger Aufmerksamkeit zukommen lassen, da es uns um Zustandsvektoren geht, wie sie die Axiome der Quantenmechanik fordern. Wir wollen das hier entwickelte Konzept später auch auf Anwendungen verallgemeinern, die nicht mehr graphisch dargestellt werden können. Die „Schulvorstellung der Pfeile in der Ebene oder im Raum“ wollen wir nun hinter uns lassen. Konzentrieren Sie sich daher bitte auf die vier oben geforderten Eigenschaften.

Anstelle der Vektoren werden wir für Zustände ganz allgemein sogenannte **Kets** verwenden. Wir werden lernen, wie wir mit ihnen rechnen können. Man kann sie aber auch einfach wieder gegen beliebige Basisvektoren ersetzen. Für das Beschreiben eines zweidimensionalen Vektorraums benötigen wir zwei Zustände. Diese nennen wir beispielsweise

$$\text{glücklich } |☺\rangle \text{ und traurig } |☹\rangle\,.$$

Eine andere Möglichkeit für Basiszustände wäre

$$\text{weiß } |○\rangle \text{ und schwarz } |●\rangle\,.$$

Es ist unerheblich, wie wir den Ket „füllen“. Anstelle von $|●\rangle$, hätten wir beispielsweise auch $|\text{schwarz}\rangle$ oder $|\text{s}\rangle$ schreiben können. Es soll lediglich beschrieben werden, welche Messgrößen man betrachten möchte.
Diese Zustände wollen wir durch Linearkombinationen miteinander verbinden und daraus sogenannte Superpositionszustände generieren. Sie werden bald lernen, welche wichtige Bedeutung diese Superpositionen haben. Eine solche kann möglicherweise

$$|{\color{gray}●}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|○\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|●\rangle \tag{1}$$

sein. Diese würde (klassisch) aussagen:„Der Zustand ‚grau‘ setzt sich zusammen aus ‚weiß‘ und ‚schwarz‘“. Superpositionen kennen Sie auch schon aus der klassischen Mechanik, beispielsweise vom waagrechten Wurf.

Die ersten beiden Punkte haben wir nun abgehandelt. Für die Punkte 3 und 4 benötigen wir das Skalarprodukt. Im Baustein „Komplexe Vektoren“ haben wir bereits gelernt, wie wir ein solches berechnen. Wir benötigen dazu die adjungierten Kets. Diese wollen wir **Bras** nennen. Die Bras sind die Elemente des Dualraums der Kets und auch umgekehrt. Die Bedeutung eines solchen Raums haben wir bereits im Baustein „Hilberträume und Skalarprodukte“angesprochen.

Ein Beispiel soll nun veranschaulichen, was dies bedeutet. Wir suchen uns einen beliebigen normierten Ket-Vektor und wollen den dazugehörigen Bra-Vektor finden.

$$|♫\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Wir adjungieren dazu $|♫\rangle$ und erhalten

$$\langle ♫| = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Ein Bra-Vektor ist immer ein Zeilenvektor und ein Ket-Vektor ist immer ein Spaltenvektor. Das Skalarprodukt kann somit einfach angegeben werden durch

$$\langle ♫| \cdot |♫\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

Als Vereinfachung beim Schreiben wird das Skalarprodukt zu einer einzelnen Klammer (engl. **Bracket**) zusammengezogen:

$$\langle ♫| \cdot |♫\rangle = \langle ♫|♫\rangle$$

Da wir nun wissen, wie wir das Skalarprodukt anschreiben und berechnen können, wollen wir uns den beiden letzten Punkten widmen und kommen dabei nochmals auf die Zustände $|\bigcirc\rangle$ und $|\CIRCLE\rangle$ zurück. Diese beiden Zustände bilden eine Orthonormalbasis.

Wir wissen bereits, dass der Betrag über das Skalarprodukt gegeben ist und daher

$$\boxed{\langle \bigcirc|\bigcirc\rangle = \langle \CIRCLE|\CIRCLE\rangle = 1}$$

gelten muss. Da jeder Zustandsvektor normiert sein muss, gilt dieser Ausdruck für alle Zustände, egal ob Basiszustände oder nicht. Wollen wir eine Linearkombination bilden und somit neue Zustände kreieren müssen wir immer auf die Normierung achten. Aus diesem Grund tritt der Faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ in Gleichung (1) auf. Außerdem gilt für die beiden aufeinander normal stehenden Basiszustände

$$\boxed{\langle \bigcirc | \bullet \rangle = \langle \bullet | \bigcirc \rangle = 0}$$

Wir haben nun alle unsere vier vorausgesetzten Punkte in den neuen Formalismus integriert und können diesen nun für alle unsere Berechnungen verwenden. Um etwas vertrauter mit dem Formalismus zu werden empfiehlt es sich etwas damit zu hantieren. Das wollen wir im Folgenden tun und auch in den Übungsaufgaben am Ende dieses Bausteins.

Das erste Beispiel mit dem wir uns hier beschäftigen wollen ist

$$\langle {\color{gray}\bullet} | \bigcirc \rangle$$

In Gleichung (1) haben wir bereits gesehen, dass $|{\color{gray}\bullet}\rangle$ sich aus $|\bigcirc\rangle$ und $|\bullet\rangle$ zusammensetzt. Der zugehörige Bra ist dann

$$\langle {\color{gray}\bullet} | = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \bigcirc | + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \bullet |$$

Nun können wir das obige Skalarprodukt berechnen.

$$\langle {\color{gray}\bullet} | \bigcirc \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle \bigcirc | + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \bullet | \right) | \bigcirc \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\langle \bigcirc | \bigcirc \rangle}_{=1} + \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\langle \bullet | \bigcirc \rangle}_{=0} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Skalarprodukte berechnen so wie wir es hier machen, wird ein wichtiges Werkzeug zum Ermitteln von Wahrscheinlichkeiten in der diskreten Quantenmechanik sein. Da Zustandsvektoren im Allgemeinen komplexe Zahlen beinhalten können, wollen wir auch hierzu ein paar Übungsbeispiele durchführen. Betrachten wir beispielsweise den folgenden Zustandsvektor, der sich wieder aus $|\bigcirc\rangle$ und $|\bullet\rangle$ zusammensetzt.

$$|{\color{blue}\bullet}\rangle = \frac{3}{5} |\bigcirc\rangle - \frac{4i}{5} |\bullet\rangle$$

Wir wollen nun das Skalarprodukt von $|\bullet\rangle$ und $|{\color{blue}\bullet}\rangle$ berechnen

$$\langle \bullet | {\color{blue}\bullet} \rangle = \langle \bullet | \left(\frac{3}{5} |\bigcirc\rangle - \frac{4i}{5} |\bullet\rangle \right) = \frac{3}{5} \langle \bullet | \bigcirc \rangle - \frac{4i}{5} \langle \bullet | \bullet \rangle = -\frac{4i}{5}$$

Wir haben in den letzten Beispielen bereits gesehen, dass wir in der sogenannten **Dirac-Notation** rechnen können, ohne uns je darüber Gedanken gemacht zu haben wie konkret unsere Zustände aussehen oder was sie beschreiben. Genau das wollten wir hier auch erreichen. Wir können physikalische Vorgänge beschreiben ohne mit konkret angegeben Zahlen zu rechnen[3]. Der große Vorteil dabei ist, dass wir bereits bekannte Zusammenhänge nicht für jedes Beispiel erneut von Beginn an durchführen müssen.

Wir wollen nun auch das Skalarprodukt der Zustände $|{\color{blue}\bullet}\rangle$ und $|{\color{orange}\bullet}\rangle$ berechnen, wobei

$$|{\color{orange}\bullet}\rangle = \frac{-4i}{5}|\circ\rangle + \frac{3}{5}|\bullet\rangle$$

gilt.

$$\langle{\color{blue}\bullet}|{\color{orange}\bullet}\rangle = \left(\frac{3}{5}\langle\circ| + \frac{4i}{5}\langle\bullet|\right)\left(\frac{-4i}{5}|\circ\rangle + \frac{3}{5}|\bullet\rangle\right) =$$

$$= -\frac{12i}{25}\langle\circ|\circ\rangle + \frac{16}{25}\langle\bullet|\circ\rangle + \frac{9}{25}\langle\circ|\bullet\rangle + \frac{12i}{25}\langle\bullet|\bullet\rangle$$

Diesen Term haben wir erhalten indem wir die Klammern vom zweiten in den dritten Schritt ausmultipliziert haben, wie Sie es bereits aus der Schule kennen: „Jedes mit Jedem“. Wir können diesen Ausdruck noch vereinfachen, da wir bereits wissen, dass die erhaltenen „Bra(c)kets“ 0 beziehungsweise 1 ergeben.

$$\langle{\color{blue}\bullet}|{\color{orange}\bullet}\rangle = -\frac{12i}{25} + \frac{12i}{25} = 0$$

Da die Zustände $|{\color{blue}\bullet}\rangle$ und $|{\color{orange}\bullet}\rangle$ orthogonal und normiert sind, bilden sie eine Orthonormalbasis des $\mathbb{C}^2$. Das bedeutet, dass wir sie anstelle der Zustände $|\bullet\rangle$ und $|\circ\rangle$ verwenden könnten um jeden anderen Zustand mit Hilfe von diesen zu beschreiben.

Sehen Sie sich dieses Kapitel noch einmal an. Wir haben nie definiert welchen konkreten Vektoren $|\bullet\rangle$ und $|\circ\rangle$ entsprechen. Das Einzige, dass wir gefordert haben, war die Lage der beiden zueinander. Man kann zum Rechnen natürlich die Standardbasis verwenden - muss man aber nicht.

3 Eine andere Kombinationsmöglichkeit

Wir haben bis jetzt die Kombination Bra-Ket untersucht. Jetzt wollen wir uns mit der Frage beschäftigen ob auch die Kombination Ket-Bra möglich wäre. Wir wollen also herausfinden, wie wir den Ausdruck

$$|\smiley\rangle\langle\smiley|$$

[3] Die einzigen Zahlen, die wir verwenden, geben relative Zusammenhänge an.

interpretieren sollen. Denken wir dazu am Besten noch einmal zurück an die Darstellung durch Vektoren. „Multipliziert“ man einen Spaltenvektor (Ket) und einen Zeilenvektor (Bra) miteinander, so erhält man eine Matrix, wie das nachstehende Beispiel verdeutlichen soll:

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix}$$

Dies ist eine sehr wichtige Erkenntnis. Wir sollten uns daher Folgendes merken:

„Bra mal Ket ist Skalar“
„Ket mal Bra ist Matrix“

Die Reihenfolge dieser Multiplikationen ist entscheidend.

4 Der Formalismus verallgemeinert

Bis jetzt haben wir nur Systeme betrachtet, die zwei mögliche Messwerte annehmen können. Wenn wir uns nun allerdings überlegen wollen, wie wir diesen Formalismus erweitern können, denken wir wohl zuerst an drei mögliche Messwerte. Dieser Fall ist noch einfach zu beschreiben, da wir uns anstelle von Vektoren im $\mathbb{C}^2$ welche im $\mathbb{C}^3$ vorstellen. Auch für vier, fünf oder weiter Dimensionen ist dies gedanklich einfach, auch wenn es rechnerisch anstrengender wird.

Doch wie sieht es aus, wenn wir die Frage stellen, wo sich ein Teilchen befindet. Wie viele Antworten sind hier zu erwarten? Im Allgemeinen könnte es überall sein und unsere diskrete Beschreibung funktioniert nicht mehr. Eine solche Frage kann erst im Rahmen der kontinuierlichen Quantenmechanik beantwortet werden. Den Platz der Zustandsvektoren nehmen nun die Wellenfunktionen ein. Das Betragsquadrat der Wellenfunktion beschreibt genau wie wahrscheinlich es ist ein Teilchen in einem bestimmten Gebiet zu finden.

Doch welche Auswirkungen hat diese Abänderung auf den Formalismus. Überlegen wir uns dazu zuallererst, noch einmal welche wichtigen Forderungen wir an unseren Formalismus gestellt haben.

1. **Normiertheit:** Jeder Zustandsvektor sollte normiert sein. Zur Erinnerung, im Dirac-Formalismus angeschrieben lautet diese Bedingung

$$\langle\bigstar|\bigstar\rangle = 1$$

Mathematisch gesehen greifen wir hier auf das komplexe Skalarprodukt zurück. Wie man ein solches für Funktionen definieren kann wurde im Baustein „Hilberträume und Skalarprodukte" diskutiert. Die Normiertheit können wir daher in folgender Weise beibehalten:

$$\int_R \psi(x,y,z)^* \psi(x,y,z) dx\, dy\, dz = 1$$

Durch geeignete Wahl der Randbedingungen[4] kann man ein Teilchen in einem Volumen R „einsperren". In einer Dimension würde diese Bedingung wie folgt aussehen:

$$\int_a^b \psi(x)^* \psi(x) dx = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx = 1$$

Ein Teilchen wird in den Grenzen von a nach b festgehalten und somit wird garantiert, dass es diesen Bereich nicht verlassen kann.

2. **Eigenwertproblem:** Die Messwerte a eines Systems, sowie dessen Eigenzustände $|\psi\rangle$, konnten wir einfach durch Lösen der Eigenwertgleichung

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = a\,|\psi\rangle$$

finden. Dieses Verfahren wird auch durch die Axiomen der Quantenmechanik gefordert. Im Baustein „Eigenwerte und Eigenvektoren" haben wir bereits besprochen, wie man die Eigenwerte und Eigenvektoren einer Matrix berechnen kann. Somit ist es kein Problem die Messwerte eines Operators zu finden, wenn dieser durch eine Matrix dargestellt ist und die Eigenzustände durch Vektoren. Nun stellt sich allerdings die Frage, wie man eine Eigenwertgleichung für Funktionen lösen kann.
Um dieser Frage nachzugehen, betrachten wir einen Operator, den Differentialoperator, der der Vorschrift entspricht „Differenziere die Wellenfunktion nach x", daher:

$$\hat{D} = \frac{\partial}{\partial x}$$

und schreiben die Eigenwertgleichung für ihn an:

$$\hat{D}\psi(x) = a\psi(x) \tag{2}$$

Diese Gleichung kann man nun folgendermaßen lesen: Wir suchen eine Funktion $\psi(x)$, sodass ihre Ableitung $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ sich, bis auf einen konstanten Faktor a, nicht von der Funktion unterscheidet. Gleichung (2) ist somit gleichbedeutend mit der Differentialgleichung

$$\psi'(x) = a \cdot \psi(x)$$

[4] Beispielsweise ein Kastenpotential

Eine Lösung[5] dieser Differentialgleichung kennen wir bereits:

$$\psi(x) = e^{a \cdot x}$$

Wir haben gesehen, dass wir ein Eigenwertproblem nicht nur für Vektoren lösen können. Selbst die stationäre Schrödingergleichung, eine grundlegende Gleichung der Quantenmechanik, die Sie in der Vorlesung kennenlernen werden, ist eine Eigenwertgleichung

$$\hat{H} \left|\psi\right\rangle = E \left|\psi\right\rangle$$

[5] Die Lösung einer solchen Differentialgleichung enthält eine Integrationskonstante. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung ist somit:

$$\psi(x) = c \cdot e^{a \cdot x}$$

Übungsaufgaben

$$\left\langle \hat{H} | \bigstar \rangle \right|$$

Ü1 Finden Sie eine Orthonormalbasis des $\mathbb{C}^2$ und drücken Sie diese durch die Zustände $|☺\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ und $|☹\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ aus.

Ü2 Überprüfen Sie, ob es sich bei $|☺\rangle\langle☺|$ um einen Projektor handelt oder nicht.

Ü3 Berechnen Sie $\langle{\color{orange}●}|○\rangle$, $|○\rangle\langle{\color{orange}●}|$ und $|\langle{\color{orange}●}|○\rangle|^2$.

Ü4 Finden Sie einen zu $|{\color{gray}●}\rangle$ orthonormalen Zustand, ausgedrückt durch $|●\rangle$ und $|○\rangle$.