

II.2.3 Kompatible und inkompatible Observablen

In diesem Abschnitt sind $\hat{A}, \hat{B} \dots$ Observablen, d.h. hermitesche Operatoren, auf einem Hilbert-Raum \mathcal{H} , der einem bestimmten physikalischen System entspricht.

II.2.3 a Kompatible Observablen: vollständige Sätze

Definition: Zwei Observablen \hat{A} und \hat{B} auf einem Hilbert-Raum \mathcal{H} werden *kompatibel* genannt, wenn sie kommutieren, d.h. wenn deren Kommutator gleich dem Null-Operator ist:

$$\hat{A} \text{ und } \hat{B} \text{ sind kompatibel} \Leftrightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{0}. \quad (\text{II.13})$$

Wenn \hat{A} und \hat{B} nicht kommutieren, werden sie als *inkompatibel* bezeichnet.

Bemerkung: Die in Gl. (II.13) benutzte Notation $\hat{0}$ für den Null-Operator, der jeden Ket $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ auf den Null-Vektor von \mathcal{H} abbildet, ist ungewöhnlich. Üblicherweise wird eher $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ geschrieben, wobei die Null implizit mit dem Identitätsoperator von \mathcal{H} (oder eigentlich mit irgendeinem Operator) zu multiplizieren ist.

Kompatible Observablen sind dadurch nützlich, dass sie sich simultan diagonalisieren lassen. Das heißt, dass man eine (Orthonormal)Basis von gemeinsamen Eigenvektoren zu den beiden Operatoren finden kann. Ein simultaner Eigenket zu kompatiblen Operatoren \hat{A}, \hat{B} wird hiernach generisch mit $|a_n b_m\rangle$ bezeichnet:

$$\hat{A}|a_n b_m\rangle = a_n |a_n b_m\rangle \quad , \quad \hat{B}|a_n b_m\rangle = b_m |a_n b_m\rangle \quad (\text{II.14})$$

Beweis: Sei $\{|a_n\rangle\}$ eine Basis von Eigenvektoren zu \hat{A} mit den Eigenwerten $\{a_n\}$. Wenn \hat{A} und \hat{B} kommutieren, gilt für alle $|a_m\rangle, |a_n\rangle$ trivial $\langle a_m | [\hat{A}, \hat{B}] | a_n \rangle = 0$, während eine direkte Berechnung zu

$$\langle a_m | [\hat{A}, \hat{B}] | a_n \rangle = \langle a_m | \hat{A} \hat{B} | a_n \rangle - \langle a_m | \hat{B} \hat{A} | a_n \rangle = a_m^* \langle a_m | \hat{B} | a_n \rangle - a_n \langle a_m | \hat{B} | a_n \rangle$$

führt, d.h., unter Berücksichtigung der Reellwertigkeit von a_m

$$\langle a_m | [\hat{A}, \hat{B}] | a_n \rangle = (a_m - a_n) \langle a_m | \hat{B} | a_n \rangle.$$

Falls $a_m \neq a_n$ soll somit $\langle a_m | \hat{B} | a_n \rangle = 0$ gelten, d.h. \hat{B} ist diagonalisiert.

Wenn $|a_m\rangle$ und $|a_n\rangle$ orthogonale Eigenvektoren mit dem gleichen Eigenwert $a_n = a_m$ sind, d.h. wenn a_n entartet ist, muss man im Eigenraum \mathcal{H}_{a_n} zu a_n arbeiten. Darauf ist die Einschränkung $\hat{A}|_{\mathcal{H}_{a_n}}$ des Operators \hat{A} proportional zur Einschränkung des Identität: $\hat{A}|_{\mathcal{H}_{a_n}} = a_n \hat{1}|_{\mathcal{H}_{a_n}}$. Dann ist die Einschränkung von \hat{B} auf dem Eigenraum hermitesch, so dass sie sich diagonalisieren lässt. In einer Basis von \mathcal{H}_{a_n} , die \hat{B} diagonalisiert, bleibt $\hat{A}|_{\mathcal{H}_{a_n}}$ diagonal, d.h. beide Operator sind nun simultan diagonal.

Dank der Existenz einer Basis solcher simultanen Eigenzustände lassen sich die physikalischen Größen, die durch kompatible Observablen \hat{A} und \hat{B} dargestellt sind, „gleichzeitig“ an einem Zustand messen.

Sei nämlich $|\psi\rangle$ der ursprüngliche Zustandsvektor des Systems. Nach einer ersten Messung von \hat{A} mit Ergebnis a_n ist das System laut dem Postulat (II.12) in einem Eigenzustand $|a_n b_m\rangle$ zu \hat{A} . Dabei ist b_m schon festgelegt, falls a_n nicht-entartet ist; sonst befindet sich das System in einem Zustand der Art $|a_n(b_m)\rangle \equiv \sum_m c_m |a_n b_m\rangle$, Linearkombination der Basisvektoren im Eigenraum des Eigenwerts a_n .

Eine darauffolgende Messung von \hat{B} projiziert den Zustandsvektor auf einen Eigenvektor zu \hat{B} , der ein nicht-verschwindendes Skalarprodukt mit $|a_n(b_m)\rangle$ haben soll [Postulat (II.9)]: dieser Eigenvektor soll somit einer der Basisvektoren $|a_n b_m\rangle$ sein.

Eine erneute Messung von \hat{A} an diesem Zustand wird wieder den Wert a_n ergeben und den Zustandsvektor unverändert lassen. Diese drei sukzessiven Messprozesse mit deren jeweiligen Er-

gebniissen können wie folgt symbolisch dargestellt werden:

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\text{von } \hat{A}]{\text{Messung}} |a_n(b_m)\rangle \xrightarrow[\text{von } \hat{B}]{\text{Messung}} |a_n b_m\rangle \xrightarrow[\text{von } \hat{A}]{\text{Messung}} |a_n b_m\rangle$$

Vollständiger Satz kommutierender Observablen

Sei jetzt eine Menge von Observablen $\hat{A}^{(1)}, \hat{A}^{(2)}, \dots, \hat{A}^{(M)}$ mit den folgenden Eigenschaften:

- Die Observablen kommutieren paarweise, d.h. $[\hat{A}^{(i)}, \hat{A}^{(j)}] = \hat{0}$ für alle i, j . Dann lassen sich die M Operatoren simultan diagonalisieren.
- Jeder gemeinsame Eigenvektor $|a_m^{(1)} a_n^{(2)} \dots a_p^{(M)}\rangle$ ist durch die Angabe der Eigenwerte $a_m^{(1)}, a_n^{(2)}, \dots, a_p^{(M)}$ eindeutig⁽⁹⁾ festgelegt. Anders gesagt sind alle gemeinsamen Eigenräume von Dimension 1.

Eine solche Menge wird *vollständiger Satz kommutierender* (oder *kompatibler*) *Observablen* (kurz: v.S.k.O.) genannt.

II.2.3 b Inkompatible Observablen und Unbestimmtheitsrelation

Im Fall inkompatibler Observablen \hat{A}, \hat{B} kann man keine Basis von simultanen Eigenvektoren finden, wie sich ad Absurdum überprüfen lässt.

Beweis: Sei angenommen, dass eine gemeinsame Basis $\{|a_n b_m\rangle\}$ von \mathcal{H} existiert. Dann gilt für jeden Basisvektor $|a_n b_m\rangle$ einerseits

$$\hat{A}\hat{B}|a_n b_m\rangle = \hat{A}(b_m|a_n b_m\rangle) = a_n b_m|a_n b_m\rangle$$

und andererseits

$$\hat{B}\hat{A}|a_n b_m\rangle = \hat{B}(a_n|a_n b_m\rangle) = b_m a_n|a_n b_m\rangle,$$

d.h. insgesamt

$$[\hat{A}, \hat{B}]|a_n b_m\rangle = a_n b_m|a_n b_m\rangle - b_m a_n|a_n b_m\rangle = |\emptyset\rangle.$$

Somit schickt der Operator $[\hat{A}, \hat{B}]$ alle Vektoren einer Basis auf den Nullvektor $|\emptyset\rangle$, was einfach bedeutet, dass $[\hat{A}, \hat{B}]$ der Null-Operator ist — d.h. die Observablen müssten kompatibel sein.

Dementsprechend wird eine Messung von \hat{B} im Allgemeinen ein in einem Eigenzustand von \hat{A} präpariertes System „stören“ und auf einen Eigenket von \hat{B} projizieren, der nicht mehr Eigenzustand zu \hat{A} ist.

Varianz einer Observablen

In der Tat ist es sogar möglich, eine untere Schranke für das Produkt der Varianzen der jeweiligen statistischen Verteilungen der Messwerte von zwei Observablen, die am gleichen Zustandsvektor gemessen werden. Für eine Observable \hat{A} wird diese Varianz im Zustand $|\psi\rangle$ als

$$\langle (\Delta_\psi \hat{A})^2 \rangle_\psi \equiv \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi \hat{\mathbb{1}}_{\mathcal{H}})^2 \rangle_\psi \tag{II.15a}$$

definiert. Indem man die Erwartungswerte im Zustand $|\psi\rangle$ explizit schreibt, lautet dies noch

$$\langle (\Delta_\psi \hat{A})^2 \rangle_\psi \equiv \langle \psi | (\hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \hat{\mathbb{1}}_{\mathcal{H}})^2 | \psi \rangle. \tag{II.15b}$$

Anhand einer einfachen Berechnung überprüft man, dass sich diese Varianz auch in der Form

$$\langle (\Delta_\psi \hat{A})^2 \rangle_\psi = \langle \hat{A}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{A} \rangle_\psi^2 = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2 \tag{II.16}$$

umschreiben lässt.

⁽⁹⁾wie immer bei Kets, bis auf einen Faktor $e^{i\delta}$.

Das Ausmultiplizieren des Quadrats in der Definition (II.15a) gibt

$$\langle (\Delta_\psi \hat{A})^2 \rangle_\psi = \langle \hat{A}^2 - 2\langle \hat{A} \rangle_\psi \hat{A} + \langle \hat{A} \rangle_\psi^2 \hat{\mathbb{1}}_{\mathcal{H}} \rangle_\psi.$$

Dank der Linearität des Erwartungswerts wird diese Gleichung zu

$$\langle (\Delta_\psi \hat{A})^2 \rangle_\psi = \langle \hat{A}^2 \rangle_\psi - 2\langle \hat{A} \rangle_\psi \langle \hat{A} \rangle_\psi + \langle \hat{A} \rangle_\psi^2 \langle \hat{\mathbb{1}}_{\mathcal{H}} \rangle_\psi = \langle \hat{A}^2 \rangle_\psi - 2\langle \hat{A} \rangle_\psi^2 + \langle \hat{A} \rangle_\psi^2 \langle \hat{\mathbb{1}}_{\mathcal{H}} \rangle_\psi.$$

Das gesuchte Resultat folgt dann aus $\langle \hat{\mathbb{1}}_{\mathcal{H}} \rangle_\psi = 1$, unabhängig vom Ket $|\psi\rangle$ \square

Die Varianz der Observablen \hat{A} im Zustand $|\psi\rangle$ ist ein Maß für die statistische Streuung der Messwerte von \hat{A} um den Erwartungswert $\langle \hat{A} \rangle_\psi$, wenn die Messungen am Zustand $|\psi\rangle$ durchgeführt werden:

- Wenn $|\psi\rangle$ ein Eigenvektor zu \hat{A} mit dem Erwartungswert a_ψ ist, ist er auch Eigenvektor zu \hat{A}^2 mit dem Erwartungswert a_ψ^2 , so dass $\langle \hat{A} \rangle_\psi = a_\psi$ und $\langle \hat{A}^2 \rangle_\psi = a_\psi^2$, und daher $\langle (\Delta_\psi \hat{A})^2 \rangle_\psi = 0$ gelten.
- Umgekehrt ist die Varianz $\langle (\Delta_\psi \hat{A})^2 \rangle_\psi$ eine nicht-negative Zahl, wenn $|\psi\rangle$ kein Eigenvektor zu \hat{A} ist, sondern eine Linearkombination $\sum c_n |a_n\rangle$ davon. Es gelten nämlich $\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum p_n a_n$ — wobei $p_n \equiv |c_n|^2$ die Wahrscheinlichkeit ist, den Eigenwert a_n zu messen [Postulat (II.9)] — und $\langle \hat{A}^2 \rangle_\psi = \sum p_n a_n^2$, und eine Variante der Cauchy–Schwarz-Ungleichung gibt

$$\left| \sum_n p_n a_n \right| \leq \left(\sum_n p_n a_n^2 \right)^{1/2} \left(\sum_n p_n \right)^{1/2},$$

was unter Berücksichtigung der Normierung $\sum_n p_n = 1$ genau $\langle \hat{A} \rangle_\psi \leq \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle_\psi}$ ist.

Bemerkungen:

- * Da die Eigenwerte $\{a_n\}$ von \hat{A} reell sind, sind solche von \hat{A}^2 — die Quadrate $\{a_n^2\}$ — alle nicht-negativ.
- * $\Delta_\psi \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi \hat{\mathbb{1}}_{\mathcal{H}}$ ist eine „zentrierte Observable“, deren Erwartungswert 0 ist.
- * Die Varianz ist ein statisches Konzept und hat deshalb nichts zu tun mit der Auflösung von Messapparaten. Zur experimentellen Bestimmung von $\langle (\Delta_\psi \hat{A})^2 \rangle_\psi$ sollen (idealerweise unendlich) viele Kopien des physikalischen Systems im gleichen Zustand $|\psi\rangle$ präpariert werden, an denen \hat{A} gemessen wird. Auch wenn der Messapparat unendlich scharf ist, wird die Prozedur eine endliche Varianz liefern, falls $|\psi\rangle$ kein Eigenzustand zu \hat{A} ist.

Unbestimmtheitsrelation

Seien \hat{A} und \hat{B} zwei Observablen. Das Produkt ihrer Varianzen genügt der *Heisenberg'schen*^(o) *Unbestimmtheitsrelation* (oder *Unschärferelation*)

$$\langle (\Delta_\psi \hat{A})^2 \rangle_\psi \langle (\Delta_\psi \hat{B})^2 \rangle_\psi \geq \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi \right|^2. \quad (\text{II.17})$$

Bemerkung: Die untere Schranke auf der rechten Seite dieser Ungleichung wird auch oft anders geschrieben, vgl. den folgenden Beweis.

Beweis: kommt!

Wenn \hat{A} und \hat{B} nicht kommutieren, existiert immer ein Ket $|\psi\rangle$, für welchen $\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi$ ungleich Null ist. Dann ist der Term auf der rechten Seite der Ungleichung (II.17) größer Null: wenn man die Varianzen $\langle (\Delta_\psi \hat{A})^2 \rangle_\psi$ und $\langle (\Delta_\psi \hat{B})^2 \rangle_\psi$ misst — auch mithilfe perfekter, unendlich scharfer Messapparate —, wird man ebenfalls streng positive Ergebnisse finden, deren Produkt der Ungleichung genügen wird. Dabei werden die zwei Varianzen typischerweise aus unterschiedlichen Kopien des in

^(o)W. HEISENBERG, 1901–1976

$|\psi\rangle$ präparierten Systems gewonnen, d.h. die Messungen sind genau gesagt nicht „gleichzeitig“ — und die Ungleichung besagt nichts über die Schärfe der Messungen.

Ein berühmtes Beispiel von Unbestimmtheitsrelation ist die Ort-Impuls-Unschärferelation, bei der \hat{A} bzw. \hat{B} der Orts- bzw. Impulsoperator ist, die sich auch im Rahmen der Wellenmechanik herleiten lässt (vgl. Abschn. ??).

Weitere Beispiele im Spin- $\frac{1}{2}$ -System werden hiernach in Abschn. II.3.3 angegeben.

Als Beispiel wird auch noch eine Energie-Zeit-Unschärferelation oft erwähnt. Dabei ist aber aufzupassen, dass es in der Quantenmechanik⁽¹⁰⁾ keinen Zeitoperator gibt — Zeit ist ein Parameter. Daher kann es kein Sonderfall der Unbestimmtheitsrelation (II.17) sein. Stattdessen ist diese Unschärferelation eher eine Aussage heuristischer Natur, während die Ungleichung (II.17) ein (bewiesenes!) Theorem ist.

⁽¹⁰⁾Sowohl in der nicht-relativistischen als in der relativistischen Quantenmechanik bzw. in der Quantenfeldtheorie.