Robertson's Berechnung der Unbestimmtheitsrelation

Heisenbergs Unbestimmtheitsrelation wurde 1929 durch Robertson quantitativ präzise formuliert.

Inhalt

1. Übersicht

In seinem Artikel „Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik“ [1] leitete Werner Heisenberg erstmals *Unbestimmtheitsrelationen* zwischen solchen beobachtbaren Größen her, deren Matrixelemente im Formalismus der Quantentheorie nicht gleichzeitig wohldefinierte Werte besitzen. Er zeigte, dass es sich dabei gerade um solche Messgrößen handelt, die nicht gleichzeitig einem präzisen messtechnischen Zugriff zugänglich sind.

Heisenberg legte – wie im Titel seiner Arbeit angekündigt – besonderen Wert auf Anschaulichkeit. Eine formal präzisere Unbestimmtheitsrelation gab Howard Percy Robertson in seinem Aufsatz „The Uncertainty Principle“ [2] im Frühjahr 1929 an. Wir leiten im Abschnitt „Unbestimmtheitsrelation“ diese Relation in der von Robertson beschriebenen Form her, und beweisen dass sie für beliebige hermitesche Operatoren und beliebige Zustandsfunktionen gültig ist.

Zuvor stellen wir im Abschnitt „Grundlagen“ kurz einige fundamentale Begriffe der Quantentheorie zusammen, nicht zuletzt um dabei auch die im Folgenden benutzte Notation zu definieren. Dann geben wir im Abschnitt „Unbestimmtheit“ eine quantitativ exakte Definition dessen, was wir unter der Unbestimmtheit einer Messgröße verstehen. Diese Definition ist rein formal. Mit keinem Wort gehen wir auf die weitreichenden erkenntnistheoretischen und philosophischen Fragen ein, die mit diesem Schlüsselbegriff der Quantentheorie verbunden sind.

2. Grundlagen

2.1. Das Skalarprodukt der Zustandsfunktionen

Die Zustandsfunktionen $|\psi\rangle$ der Quantentheorie sind Elemente eines Vektorraumes $\mathcal{H}$ über dem Körper $\mathbb{C}$ der komplexen Zahlen. Sie heißen Zustandsfunktionen, weil sie Informationen über den Zustand eines physikalischen Systems enthalten. Das Skalarprodukt S der Zustandsfunktionen ist als bilineare Abbildung von $\mathcal{H}$ nach $\mathbb{C}$ definiert:

$$\begin{gathered} S : \mathcal{H} \to \mathbb{C} \\ S(|\psi\rangle, |\phi\rangle) = \langle\phi|\psi\rangle \in \mathbb{C} \;\text{ mit } |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H} \end{gathered} \tag{1}$$

Das Skalarprodukt hat folgende Eigenschaften (der Stern* bedeutet „konjugiert komplex“):

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^* \tag{2a}$$
$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0 \tag{2b}$$
$$\langle\phi|\psi + \chi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle + \langle\phi|\chi\rangle \tag{2c}$$
$$\langle\phi|c\psi\rangle = c\langle\phi|\psi\rangle \quad \text{mit } c \in \mathbb{C} \tag{2d}$$
$$\langle c\phi|\psi\rangle = c^*\langle\phi|\psi\rangle \quad \text{mit } c \in \mathbb{C} \tag{2e}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\langle\phi|\psi\rangle = \langle\frac{\partial\phi}{\partial x}|\psi\rangle + \langle\phi|\frac{\partial\psi}{\partial x}\rangle \tag{2f}$$

Wegen (2a) ist das Skalarprodukt einer Zustandsfunktion mit sich selbst immer reell

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle^* \in \mathbb{R} \ , \tag{3}$$

so dass (2b) sinnvoll ist. Wir beweisen auch noch die Schwarz'sche[1] Ungleichung

$$\langle\psi|\phi\rangle\langle\phi|\psi\rangle = |\langle\psi|\phi\rangle|^2 \leq \langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle \ , \tag{4}$$

die für beliebige Vektoren $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ gültig ist. Im Fall $|\psi\rangle = |\phi\rangle$ ist sie trivialerweise richtig, wir brauchen also nur noch den Fall $|\psi\rangle \neq |\phi\rangle$ zu betrachten. Höchstens einer der beiden Vektoren kann dann gleich dem Nullvektor sein (für den als einzigem Vektor $\langle 0|0\rangle = 0$ gilt), und wir legen o.B.d.A. für den folgenden Beweis

$$\langle\phi|\phi\rangle \neq 0 \tag{5}$$

fest. Für beliebige Vektoren $\in \mathcal{H}$, und für beliebige $c \in \mathbb{C}$ gilt

$$\begin{aligned} 0 &\overset{(2b)}{\leq} \langle\psi + c\phi|\psi + c\phi\rangle \\ 0 &\leq \langle\psi|\psi\rangle + c^*\langle\phi|\psi\rangle + c\langle\psi|\phi\rangle + c^*c\langle\phi|\phi\rangle \end{aligned} \tag{6}$$

Wegen $c^*\langle\phi|\psi\rangle \overset{(2a)}{=} (c\langle\psi|\phi\rangle)^*$ ist $(c^*\langle\phi|\psi\rangle + c\langle\psi|\phi\rangle) \in \mathbb{R}$. Und natürlich ist auch das Betragsquadrat $c^*c\langle\phi|\phi\rangle \in \mathbb{R}$. Wir dürfen also auf beiden Seiten der Ungleichung $c^*\langle\phi|\psi\rangle + c\langle\psi|\phi\rangle + c^*c\langle\phi|\phi\rangle$ subtrahieren:

[1] Übrigens hat Cauchy diese Ungleichung schon ein halbes Jahrhundert vor Schwarz entdeckt.

$$-c^*\langle\phi|\psi\rangle - c\langle\psi|\phi\rangle - c^*c\langle\phi|\phi\rangle \leq \langle\psi|\psi\rangle \tag{7}$$

Mit der Definition

$$c \equiv -d\cdot\frac{\langle\phi|\psi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}\ ,\ c^* \equiv -d^*\cdot\frac{\langle\psi|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}\quad \text{mit } d\in\mathbb{C} \tag{8}$$

folgt

$$\begin{aligned} d^*\frac{\langle\psi|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}\langle\phi|\psi\rangle + d\frac{\langle\phi|\psi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}\langle\psi|\phi\rangle - d^*\frac{\langle\psi|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}d\frac{\langle\phi|\psi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}\langle\phi|\phi\rangle &\leq \langle\psi|\psi\rangle \\ (d^*+d-d^*d)\cdot\langle\psi|\phi\rangle\langle\phi|\psi\rangle \leq \langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle\ . \end{aligned} \tag{9}$$

Die Aussage der Ungleichung soll möglichst stark sein, dazu suchen wir das maximale (d^*+d-d^*d). Mit der Definition

$$d \equiv a + ib \quad \text{mit } a, b \in \mathbb{R} \tag{10}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} (d^*+d-d^*d) &= a - ib + a + ib - a^2 - b^2 \\ &= 2a - a^2 - b^2 \\ &\text{ist maximal für } b = 0 \text{ und } d = a = 1\ , \end{aligned} \tag{11}$$

womit die Schwarz'sche Ungleichung (4) bewiesen ist.

2.2. Operatoren

Eine Abbildung

$$\begin{aligned} A:\ \mathcal{H} &\to \mathcal{H} \\ A|\psi\rangle = |\phi\rangle\ &\text{ mit } |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H} \end{aligned} \tag{12}$$

wird als Operator bezeichnet. Häufig werden wir auch folgende Schreibweise verwenden:

$$|A\psi\rangle \equiv A|\psi\rangle \tag{13}$$

Wenn das untersuchte physikalische System durch den Zustandsvektor $|\psi\rangle$ beschrieben wird, dann ist der Erwartungs- oder Mittelwert des Operators A als

$$\langle A\rangle_\psi \equiv \frac{\langle\psi|A\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \in \mathbb{C} \tag{14}$$

definiert. Um die Schreibarbeit zu vereinfachen, werden wir im Folgenden ausschließlich normierte Zustandsfunktionen verwenden, die durch $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ definiert sind. (14) vereinfacht sich dann zu

$$\langle A\rangle_\psi \equiv \langle\psi|A\psi\rangle \in \mathbb{C} \ . \tag{15}$$

Jedem Operator A ist ein adjungierter Operator A^+ durch die Relation

$$\langle A^+\phi|\psi\rangle \equiv \langle\phi|A\psi\rangle \tag{16}$$

zugeordnet.

2.3. Hermitesche Operatoren

Falls $A^+ = A$ ist, so wird A als selbstadjungiert oder hermitesch bezeichnet.

$$\text{Definition:} \quad A \text{ ist hermitesch} \iff A^+ = A \tag{17}$$

Wir werden jetzt zeigen: Der Erwartungswert eines Operators ist für beliebige Zustandsfunktionen genau dann reell, wenn der Operator hermitesch ist.

$$\langle A\rangle_\psi \equiv \langle\psi|A\psi\rangle \in \mathbb{R} \ \forall \ |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \iff \quad A^+ = A \tag{18}$$

Zunächst zeigen wir, dass der Erwartungswert eines hermiteschen Operators A notwendig reell ist, indem wir zeigen dass $\langle A\rangle_\psi = \langle A\rangle_\psi^*$ gilt:

$$\langle A\rangle_\psi \overset{(15)}{=} \langle\psi|A\psi\rangle \overset{(16)}{=} \langle A^+\psi|\psi\rangle \overset{(17)}{=} \langle A\psi|\psi\rangle \overset{(2a)}{=} \langle\psi|A\psi\rangle^* \overset{(15)}{=} \langle A\rangle_\psi^* \tag{19}$$

Nur geringfügig schwieriger ist die umgekehrte Richtung des Beweises. Wir haben zu zeigen, dass A hermitesch ist, falls sein Erwartungswert für beliebige Zustandsfunktionen reell ist. Dazu berechnen wir den Erwartungswert $\langle A\rangle_\chi$ für den Zustand $|\chi\rangle \equiv |\psi\rangle + c|\phi\rangle$ mit $c \in \mathbb{C}$:

$$\begin{aligned}\langle A\rangle_\chi &\overset{(15)}{=} \langle\chi|A\chi\rangle \\ &\overset{(2c)}{=} \langle\psi|A\psi\rangle + c^*\langle\phi|A\psi\rangle + c\langle\psi|A\phi\rangle + c^*c\langle\phi|A\phi\rangle\end{aligned} \tag{20}$$

Wir haben $\langle A\rangle_\chi \in \mathbb{R}$ für beliebige Zustandsfunktionen vorausgesetzt. Der erste und der vierte Summand auf der rechten Seite von (20) sind also auf jeden Fall reell. Also ist auch der Rest von (20) reell und demzufolge gleich seinem konjugiert komplexen:

$$\begin{aligned}c^*\langle\phi|A\psi\rangle + c\langle\psi|A\phi\rangle &= c\langle\phi|A\psi\rangle^* + c^*\langle\psi|A\phi\rangle^* \\ &\overset{(2a)}{=} c\langle A\psi|\phi\rangle + c^*\langle A\phi|\psi\rangle\end{aligned} \tag{21}$$

Alternativ können wir die beiden Summanden auch mithilfe des adjungierten Operators A^+ schreiben:

$$c^*\langle\phi|A\psi\rangle + c\langle\psi|A\phi\rangle \overset{(16)}{=} c^*\langle A^+\phi|\psi\rangle + c\langle A^+\psi|\phi\rangle \tag{22}$$

Nur wenn A hermitesch ist sind (21) und (22) für beliebige ψ, ϕ, c gleichzeitig erfüllt:

$$\langle A\rangle_\chi \in \mathbb{R} \overset{(21),(22)}{\Longrightarrow} A^+ = A \overset{(17)}{\equiv} A \text{ ist hermitesch.} \tag{23}$$

2.4. Antihermitesche Operatoren

Als letzten Schritt der Vorbereitung für unser eigentliches Thema beweisen wir jetzt noch, dass der Kommutator zweier hermitescher Operatoren antihermitesch und sein Erwartungswert für beliebige Zustandsfunktionen imaginär ist. Dazu definieren wir zunächst, was wir unter einem antihermiteschen Operator C verstehen:

$$\text{Definition:} \quad C \text{ ist antihermitesch} \iff C^+ = -C \tag{24}$$

Wir betrachten den Kommutator zweier hermitescher Operatoren:

$$(AB - BA) \quad \text{mit } A^+ = A \text{ und } B^+ = B \tag{25}$$

Der Erwartungswert von $(AB - BA)$ für eine beliebige Zustandsfunktion $|\psi\rangle$ ist

$$\begin{aligned}
\langle\psi|(AB - BA)\psi\rangle &\overset{(2c)}{=} \langle\psi|AB\psi\rangle - \langle\psi|BA\psi\rangle \\
&\overset{(16)}{=} \langle A^+\psi|B\psi\rangle - \langle B^+\psi|A\psi\rangle \\
&\overset{(16)}{=} \langle B^+A^+\psi|\psi\rangle - \langle A^+B^+\psi|\psi\rangle \\
&\overset{(2c)}{=} -\langle(A^+B^+ - B^+A^+)\psi|\psi\rangle \\
&\overset{(25)}{=} -\langle(AB - BA)\psi|\psi\rangle \\
&\overset{(16)}{=} \langle(AB - BA)^+\psi|\psi\rangle \\
&\Longrightarrow \quad (AB - BA)^+ = -(AB - BA) \quad ,
\end{aligned} \tag{26}$$

also ist der Kommutator zweier hermitescher Operatoren antihermitesch. Der Erwartungswert eines beliebigen antihermiteschen Operators ist für beliebige Zustandsfunktionen imaginär:

$$\begin{aligned}
&\langle C\rangle_\psi = \langle\psi|C\psi\rangle = \langle C^+\psi|\psi\rangle = -\langle C\psi|\psi\rangle = -\langle\psi|C\psi\rangle^* = -\langle C\rangle_\psi^* \\
&\Longrightarrow \quad \langle C\rangle_\psi \text{ ist imaginär, wenn } C^+ = -C\ .
\end{aligned} \tag{27}$$

3. Unbestimmtheit

Die Quantentheorie ordnet jeder messbaren Größe einen hermiteschen Operator zu. Wenn einer bestimmten Größe der Operator A zugeordnet ist und das untersuchte physikalische Objekt sich im Zustand $|\psi\rangle$ befindet, dann wird der Messwert dieser Größe im Mittel gleich dem Erwartungswert

$$\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|A\psi\rangle \quad \in \mathbb{R} \tag{28}$$

sein. Dabei bedeutet „im Mittel“, dass im Allgemeinen nicht jede Messung den Wert $\langle A\rangle_\psi$ ergeben wird. Vielmehr werden bei wiederholter Messung die Messwerte mehr oder weniger stark um $\langle A\rangle_\psi$ streuen, und nur der Mittelwert sehr vieler Messungen wird gleich $\langle A\rangle_\psi$ sein.

Wir suchen jetzt ein geeignetes Maß, um die Streuung der Messwerte um ihren Mittelwert zu quantifizieren. Ein ungeeignetes Maß wäre die mittlere Abweichung vom Mittelwert, denn die ist Null:

$$\langle A - \langle A\rangle_\psi\rangle_\psi = \langle A\rangle_\psi - \langle\langle A\rangle_\psi\rangle_\psi = \langle A\rangle_\psi - \langle A\rangle_\psi = 0 \tag{29}$$

Ein brauchbares Maß ist dagegen die mittlere quadratische Abweichung:

$$\begin{aligned}\langle\, (A - \langle A\rangle_\psi)^2\,\rangle_\psi &= \langle\, A^2 - 2A\langle A\rangle_\psi + \langle A\rangle_\psi^2\,\rangle_\psi \\ &= \langle A^2\rangle_\psi - 2\langle A\rangle_\psi\langle A\rangle_\psi + \langle A\rangle_\psi^2 \\ &= \langle A^2\rangle_\psi - \langle A\rangle_\psi^2 \end{aligned} \tag{30}$$

Als Maß für die Streuung ΔA_ψ der Messwerte um den Mittelwert im Zustand ψ verwenden wir deshalb die

$$\text{Definition:} \quad \Delta A_\psi \equiv {}_{+}\sqrt{\langle\, (A - \langle A\rangle_\psi)^2\,\rangle_\psi} = {}_{+}\sqrt{\langle A^2\rangle_\psi - \langle A\rangle_\psi^2} \tag{31}$$

4. Unbestimmtheitsrelation

A und B seien hermitesche Operatoren. Wir definieren die hermiteschen Operatoren

$$A' \equiv A - \langle A \rangle_\psi \quad \text{und} \quad B' \equiv B - \langle B \rangle_\psi \ , \tag{32}$$

und wenden die Cauchy/Schwarz'sche Ungleichung (4) an:

$$\langle A'\psi | A'\psi \rangle \langle B'\psi | B'\psi \rangle \geq \langle A'\psi | B'\psi \rangle \langle B'\psi | A'\psi \rangle = \Big| \langle A'\psi | B'\psi \rangle \Big|^2$$

Weil die hermiteschen Operatoren A' und B' selbstadjungiert sind, kann mithilfe der Definition (31) die Ungleichung als

$$\langle \psi | A'A'\psi \rangle \langle \psi | B'B'\psi \rangle = (\Delta A_\psi)^2 (\Delta B_\psi)^2 \geq \Big| \langle A'\psi | B'\psi \rangle \Big|^2 \tag{33}$$

geschrieben werden. Hier wurde (32) eingesetzt.

Nach dem Satz des Pythagoras ist das Betragsquadrat einer komplexen Zahl gleich dem Betragsquadrats ihres Realteils plus dem Betragsquadrat ihres Imaginärteils. Damit entwickeln wir die rechte Seite von (33):

$$\begin{aligned} \Big| \langle A'\psi | B'\psi \rangle \Big|^2 &\overset{(2a)}{=} \langle A'\psi | B'\psi \rangle \langle B'\psi | A'\psi \rangle = \qquad (34a) \\ &= \Big| \frac{\langle A'\psi | B'\psi \rangle + \langle B'\psi | A'\psi \rangle}{2} \Big|^2 + \Big| \frac{\langle A'\psi | B'\psi \rangle - \langle B'\psi | A'\psi \rangle}{2i} \Big|^2 \end{aligned}$$

Zuerst betrachten wir den Zähler des Realteils:

$$\begin{aligned} &\langle A'\psi | B'\psi \rangle + \langle B'\psi | A'\psi \rangle = \langle \psi | A'B'\psi \rangle + \langle \psi | B'A'\psi \rangle \overset{(32)}{=} \\ &= \langle \psi | (A - \langle A \rangle_\psi)(B - \langle B \rangle_\psi)\psi \rangle + \langle \psi | (B - \langle B \rangle_\psi)(A - \langle A \rangle_\psi)\psi \rangle = \\ &= \langle \psi | (AB - \langle B \rangle_\psi A - \langle A \rangle_\psi B + \langle A \rangle_\psi \langle B \rangle_\psi | \psi \rangle + \\ &\quad + \langle \psi | (BA - \langle A \rangle_\psi B - \langle B \rangle_\psi A + \langle B \rangle_\psi \langle A \rangle_\psi | \psi \rangle = \\ &= \langle AB + BA \rangle_\psi - 2\, \langle A \rangle_\psi \langle B \rangle_\psi \end{aligned} \tag{34b}$$

Als nächstes analysieren wir den Zähler des Imaginärteils:

$$\begin{aligned}
&\langle A'\psi|B'\psi\rangle - \langle B'\psi|A'\psi\rangle = \\
&= \langle\psi|(A-\langle A\rangle_\psi)(B-\langle B\rangle_\psi)\psi\rangle - \langle\psi|(B-\langle B\rangle_\psi)(A-\langle A\rangle_\psi)\psi\rangle = \\
&= \langle AB - BA\rangle_\psi
\end{aligned} \tag{34c}$$

Wir setzen (34) in (33) ein, und berechnen die positive Quadratwurzel:

$$\begin{aligned}
&\Delta A_\psi \cdot \Delta B_\psi \geq \\
&\geq \frac{1}{2} \cdot {}_{+}\!\sqrt{\Big|\langle AB + BA\rangle_\psi - 2\,\langle A\rangle_\psi \langle B\rangle_\psi\Big|^2 + \Big|\langle AB - BA\rangle_\psi\Big|^2}\;.
\end{aligned} \tag{35}$$

Diese Form der Unbestimmtheitsrelation wurde von Schrödinger [3] 1930 angegeben.

Robertson startete zwar ebenfalls mit der Cauchy-Schwarz'schen Ungleichung (33), ging dann aber folgendermaßen vor: Er nahm an, dass die Operatoren A und B als Funktionen des Ortsoperators x, y, z und des Impulsoperators $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$ geschrieben werden können, integrierte dann (33) partiell, und vernachlässigte schließlich den Oberflächenterm seines Resultats. Auf diese Weise fand er

$$\boxed{\Delta A_\psi \cdot \Delta B_\psi \geq \frac{1}{2}\Big|\langle AB - BA\rangle_\psi\Big|}\quad . \tag{36}$$

Offensichtlich kommen wir mit Schrödinger's einfacherer und allgemeinerer Methode zum gleichen Ergebnis, indem wir einfach das erste Betragsquadrat unter der Wurzel in (35) vernachlässigen. Schätzen wir den Wert dieses Terms ab:

$$\begin{aligned}
&\Big|\langle AB + BA\rangle_\psi - 2\,\langle A\rangle_\psi \langle B\rangle_\psi\Big| = \\
&\qquad = \Big|\Big\langle AB - \langle B\rangle_\psi A\Big\rangle_\psi - \Big\langle A\langle B\rangle_\psi - BA\Big\rangle_\psi\Big|
\end{aligned} \tag{37a}$$

Wenn der Kommutator $[A, B]$ gleich Null ist, dann ist (37a) gleich Null, und die rechten Seiten von (35) und (36) sind beide Null. Wenn $[A, B] \neq 0$ ist, dann wird in den meisten Fällen immer noch

$$\left|\Big\langle AB - \langle B\rangle_\psi A\Big\rangle_\psi - \Big\langle A\langle B\rangle_\psi - BA\Big\rangle_\psi\right| \ll \left|\langle AB - BA\rangle_\psi\right| \quad (37b)$$

sein. Wenn wir eine geringfügig stärkere Ungleichung als Robertson's Resultat (36) haben wollen, dann können wir natürlich stattdessen Schrödinger's vollständige Ungleichung (35) verwenden, ohne irgend einen Term zu vernachlässigen.

Literatur

[1] W. Heisenberg : *Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik* , Z. Phys. **43**, 172 – 198 (1927), http://dx.doi.org/10.1007/BF01397280 oder: https://www.uni-trier.de/fileadmin/fb1/PHI/Jaeckels_-_Dokumente/Heisenberg_Unbestimmtheitsrelation.pdf

[2] H. P. Robertson : *The Uncertainty Principle* , Phys. Rev. **34**, 163 – 164 (1929), https://doi.org/10.1103/PhysRev.34.163

[3] E. Schrödinger : *Zum Heisenbergschen Unschärfeprinzip*, Sitz. Ber. Preuß. Ak. Wiss., Phys.-Math. **14**, 296 – 303 (1930)