Observablen und Zustände[1]

Seminar "Mathematische Strukturen der Quantenmechanik"

Raimar Wulkenhaar

1 Klassische Mechanik

Gegeben sei ein System der klassischen Mechanik aus N Massepunkten. Die *Konfiguration* kann dann aufgefaßt werden als Punkt q in einer $3N$-dimensionalen Mannigfaltigkeit M. Die Bewegungsgleichungen sind Differentialgleichungen 2. Ordnung, so daß die *Dynamik* des Systems im Kotangentialbündel T^*M zu beschreiben ist. Der *Zustand* eines Systems ist dann ein Punkt $(q,p) \in T^*M$ im Kotangentialbündel. Nebenbedingungen schränken T^*M auf den *Phasenraum* $\Gamma \subset T^*M$ ein, im einfachsten Fall ist Γ eine kompakte Untermannigfaltigkeit (Bewegung und Energie beschränkt). *Observable* (also beobachtbare Größen) sind zumindest alle Polynome in (q_i, p_i). Es ist dann naheliegend, die Polynomalgebra in der sup-Norm abzuschließen und sogar komplexwertige Funktionen zuzulassen. Es entsteht die *kommutative C^*-Algebra* der stetigen Funktionen $\mathcal{C}(\Gamma)$ als zulässige Menge der Observablen. Durch Auswertung von $f \in \mathcal{C}(\Gamma)$ im Punkt $(q,p) \in \Gamma$ liefert ein Zustand (q,p) die Werte sämtlicher Observablen f. Im Prinzip ließe sich umgekehrt nach Gelfand-Naimark der Zustandsraum Γ als Raum der Charaktere aus den Observablen $\mathcal{C}(\Gamma)$ rekonstruieren. Die dabei erforderliche Multiplikativität $\chi(fg) = \chi(f)\chi(g)$ der Charaktere ist jedoch physikalisch unmotiviert. Sie wird später abgeschwächt. Unter einigen technischen Annahmen werden wir auch für die Quantenphysik eine Beschreibung durch C^*-Algebren erhalten. Diese werden dann aber nichtkommutativ sein.

Einige Bemerkungen zur Zeitentwicklung, die für Klassische Mechanik und Quantenmechanik auf analogen Prinzipien beruht. Das Kotangentialbündel $T^*(\mathbb{R}^{3N})$ trägt eine kanonische symplektische Struktur, d.h. es gibt eine geschlossene nichtausgeartete Zweiform Ω. Es wird gefordert, daß die Einschränkung auf den Phasenraum eine symplektische Struktur auf Γ liefert, bezeichnet ebenfalls mit Ω. Die *Dynamik* des Systems ist dann gegeben durch *Symplektomorphismen*, also Diffeomorphismen $\phi : \Gamma \to \Gamma$ mit $\phi^*\Omega = \Omega$ (Pull-back). Infinitesimal (Lie-Algebra) sind solche Symplektomorphismen durch symplektische Vektorfelder X_H generiert; sie erfüllen $\mathcal{L}_{X_H}\Omega = 0$ (Lie-Ableitung). Jedem symplektischen Vektorfeld X_H entspricht eine Hamilton-Funktion $H(q,p)$ auf Γ durch $dH(Y) = \Omega(X_H, Y)$, für beliebige Vektorfelder Y auf Γ. Bezüglich der kanonischen sym-

[1]Nach [1], Kapitel 1.2+1.3

plektischen Struktur $\Omega = \sum_i dq_i \wedge dp_i$ sind die Integralkurven $(q(t), p(t))$ von X_H gegeben als Lösungen der Hamiltonschen Gleichungen $\dot{q}_i = \frac{\partial H(q,p)}{\partial p_i}$ und $\dot{p}_i = -\frac{\partial H(q,p)}{\partial q_i}$. In der Quantenmechanik wird die Dynamik durch $*$-Automorphismen der Algebra implementiert.

2 Zustände der klassischen Mechanik als lineare Funktionale

Die Auswertung einer Observable f in einem Zustand $\omega = (q, p)$ ist stets mit Meßfehlern verbunden. Man wird deshalb wiederholt $f(\omega)$ messen, dabei die Meßwerte $m_1^\omega(f), m_2^\omega(f), \dots \in \mathbb{R}$ erhalten und dann den Mittelwert $\langle f \rangle_n^{(\omega)} := \frac{1}{n}(m_1^\omega(f) + \dots + m_n^\omega(f))$ bilden. Idealisiert würde man $\omega(f) := \lim_{n\to\infty} \langle f \rangle_n^{(\omega)}$ als *Erwartungswert* der Observablen f im Zustand ω ansetzen. Entscheidend ist nun, daß per *Dualität* die Messungen $m_\omega^i : f \to \mathbb{R}$ eine Vektorraum-Struktur auf der Menge aller Observablen induziert. Sind f, g zwei Observable und $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$, so kann man eine Observable $\lambda f + \mu g$ *definieren* als Linearkombination der Meßwerte,

$$m_i^\omega(\lambda f + \mu g) := \lambda m_i^\omega(f) + \mu m_i^\omega(g) \; .$$

Dabei wird zunächst stillschweigend angenommen, daß die Meßwerte einheitslos, also komplexe Zahlen, sind. Viel gravierender ist aber die Annahme, *daß die Messung $m_i^\omega(f)$ den Zustand ω unverändert läßt, so daß man anschließend unabhängig von der ersten Messung die Observable g im gleichen Zustand ω messen kann mit Meßwert $m_i^\omega(g)$*. Die Mittelwertbildung führt dann auf $\omega(\lambda f + \mu g) = \lambda\omega(f) + \mu\omega(g)$.

Ebenso könnte man versuchen, auch das Produkt von Observablen zu erklären über das Produkt der Meßwerte:

$$m_i^\omega(fg) := m_i^\omega(f) m_i^\omega(g) \; .$$

Man sieht jedoch sofort, daß für die Mittelwerte diese Produkt-Struktur verloren geht, falls die Meßwerte schwanken:

$$\frac{1}{2}\big(m_1^\omega(f)m_1^\omega(g) + m_2^\omega(f)m_2^\omega(g)\big) \neq \frac{1}{2}\big(m_1^\omega(f) + m_2^\omega(f)\big) \cdot \frac{1}{2}\big(m_1^\omega(g) + m_2^\omega(g)\big)$$

Nicht einmal für $g = f$ gilt die Multiplikativität. Ist jedoch $g = f$, so sind alle $m_i^\omega(f^2) \geq 0$, so daß in jedem Fall gilt $\omega(f^2) \geq 0$). Wir erhalten also:

Satz 1 *Die Zustände eines mechanischen Systems sind lineare positive Funktionale auf der kommutativen Algebra $\mathcal{C}_{\mathbb{R}}(\Gamma)$. Diese können als normiert $\omega(1) = 1$ angenommen werden.*

Ein Zustand ω ist linear und beschränkt, also stetig, und definiert nach dem Riesz-Markov-Theorem ein Wahrscheinlichkeits-Maß μ_ω auf Γ mit

$$\omega(f) = \int_\Gamma d\mu_\omega \, f \ , \qquad \mu_\omega(\Gamma) = \omega(1) = 1 \ , \qquad f \in \mathcal{C}_\mathbb{R}(\Gamma) \ .$$

Auf diese Weise erhalten die Erwartungswerte eine Wahrscheinlichkeits-Interpretation, die Zustände werden zu Wahrscheinlichkeits-Verteilungen und die Observablen zu Zufalls-Variablen. Im Idealfall beliebig genauer Meßbarkeit ist $\omega = (q,p)$ durch das Dirac-Maß $\mu_\omega = \delta_{(q,p)}$ gegeben; dann folgt $\omega(f) = f(q,p)$. Bei sehr vielen Punktmassen ($\sim 10^{23}$) ist die Wahrscheinlichkeits-Interpretation unverzichtbar. Es kommt effektiv zu einer enormen Reduktion der Menge der Zustände auf wenige thermodynamische Freiheitsgrade.

3 Allgemeine Formulierung bei Auszeichnung der Meßwerte

Die obige Diskussion basierte entscheidend auf der Annahme, *daß die Messung einer Observable A den Zustand nicht verfälscht*. Heisenberg hat sehr sorgfältig argumentiert, daß für Objekte der Atomphysik diese Annahme nicht gelten kann: Nur die Meßwerte $\omega(A) \in \mathbb{R}$ haben eine physikalische Bedeutung, nicht aber die Zustände ω und die Observablen A separat. Wir diskutieren, welche Information allein in den Erwartungswerten steckt.

Sei $\mathcal{O}$ die Menge der Observablen eines Systems. Wenn man nur eine Observable $A \in \mathcal{O}$ herausgreift, so lassen sich aus *einem einzigen Meßwert $m_i^\omega(A)$* alle Polynome definieren. Durch Mittelwertbildung können wir dann den Erwartungswert eines Zustands ω auf allen Polynomen in A erklären. Dabei gilt $\omega(A^2) \geq 0$ für jeden Zustand ω. Umgekehrt nennen wir eine Observable $B \in \mathcal{O}$ *positiv*, falls $\omega(B) \geq 0$ für jeden Zustand ω.

Die Auszeichnung der Meßwerte führt zu Äquivalenzrelationen. Wir sagen $A \sim B$ falls $\omega(A) = \omega(B)$ für jeden Zustand ω, und $\omega_1 \sim \omega_2$ falls $\omega_1(A) = \omega_2(A)$ für jede Observable A. In Worten: Die Zustände separieren die Observablen, und die Observablen separieren die Zustände.

Wir definieren

$$\|A\| := \sup_\omega |\omega(A)|$$

als Supremum der (Beträge der) Meßwerte. Für $\|A\| = 0$ ist $\omega(A) = 0$ für alle ω und damit entsprechend der Äquivalenzklassenbildung $A = 0$. Außerdem gilt $\|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|$.

Lemma 1 *Es gilt $\|A^2\| = \|A\|^2$.*

Beweis. Es gilt $-\|A\| \leq \omega(A) \leq \|A\|$ und somit

$$\omega(\|A\|1 + A) = \|A\| + \omega(A) \geq 0 \qquad \text{und} \qquad \omega(\|A\|1 - A) = \|A\| - \omega(A) \geq 0 \ .$$

Somit sind $\|A\|1+A$, $\|A\|1-A$ positive Polynome von A, d.h. beliebige Meßwerte sind positiv. Dann ist aber auch $(\|A\|1+A)(\|A\|1-A) = \|A\|^2 1 - A^2$ positiv und deshalb

$$0 \leq \omega(\|A\|^2 1 - A^2) = \|A\|^2 - \omega(A^2)$$

Nach Supremumsbildung folgt $\|A^2\| \leq \|A\|^2$.

Aus der Positivität von $(\|A\|1 \pm A)^2$ folgt

$$0 \leq \omega(\|A\|^2 1 \pm 2A\|A\| + A^2) = \|A\|^2 \pm 2\|A\|\omega(A) + \omega(A^2) \quad \Rightarrow \quad \mp 2\|A\|\omega(A) \leq \|A\|^2 + \omega(A^2)$$

also

$$2\|A\||\omega(A)| \leq \|A\|^2 + \omega(A^2) \leq \|A\|^2 + \|A^2\|$$

und damit nach Supremums-Bildung $\|A\|^2 \leq \|A^2\|$. □

Die lineare Struktur der Erwartungswerte erlaubt es nun, per Dualität *Linearkombinationen von Observablen* zu erklären. Sind $A, B \in \mathcal{O}$ für sich definiert und $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$, so wird eine Größe $C := \lambda A + \mu B$ eindeutig *definiert* durch die Auswertung in allen Zuständen, so daß es genügt zu setzen $\omega(C) := \lambda\omega(A) + \mu\omega(B)$. Es folgt sofort $\|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|$, d.h. die Erweiterung der Observablenmenge $\mathcal{O}$ um formale Linearkombinationen der Observablen wird somit zu einem normierten Vektorraum, den wir zu einem reellen Banach-Raum vervollständigen können. Dieser sei wieder mit $\mathcal{O}$ bezeichnet. Die Zustände setzen sich auf die Vervollständigung fort: Ist (A_n) eine Cauchy-Folge in $\mathcal{O}$, dann ist $|\omega(A_n) - \omega(A_m)| = |\omega(A_n - A_m)| \leq \|A_n - A_m\| < \epsilon$ für jedes ω, so daß $\omega(A_n)$ in $\mathbb{R}$ konvergent ist.

Da diese Linearkombinationen nur über die *Erwartungswerte*, und nicht über ihre Meßwerte, erklärt ist, ist völlig unklar, was $\omega((A+B)^n)$ sein soll. Die Potenzen $(A+B)^n$ besitzen i.a. keine operationelle Bedeutung mehr; sie gehören dann nicht zu $\mathcal{O}$. Es ist deshalb eine *echte mathematische Erweiterung über die physikalische Situation hinaus*, daß sich Zustände auch auf sämtliche Potenzen $(A+B)^n$ fortsetzen. Erlaubt man $(A+B)^n \in \mathcal{O}$, dann läßt sich ein Produkt von Observablen erklären als

$$A \circ B = \frac{1}{2}\big((A+B)^2 - A^2 - B^2\big) = B \circ A\ .$$

Dieses kommutative Produkt wird jedoch weder assoziativ noch distributiv sein! Die Distributivität folgt zumindest aus der naheliegenden Homogenitäts-Annahme $A \circ (\lambda B) = \lambda(A \circ B) = (\lambda A) \circ B$. Dann gilt nämlich

$$2A^2 + 2B^2 = (A+B)^2 + (A-B)^2\ ,$$

woraus folgt:

$$\begin{aligned}
&2(A+B) \circ C - 2A \circ C - 2B \circ C \\
&= \big((A+B+C)^2 - (A+B)^2 - C^2\big) - \big((A+C)^2 - A^2 - C^2\big) - \big((B+C)^2 - B^2 - C^2\big) \\
&= \big((A+B+C)^2 + A^2\big) + \big(B^2 + C^2\big) - \big((A+B)^2 + (A+C)^2\big) - \big((B+C)^2\big) = 0
\end{aligned}$$

Die Distributivität liefert dann

$$0 \le \omega\big((A+\lambda B)^2\big) = \omega(A^2) + 2\lambda\omega(A \circ B) + \lambda^2\omega(B^2) \qquad \text{für alle } \lambda \in \mathbb{R} ,$$

woraus nach Cauchy-Schwarz-Argument folgt

$$|\omega(A \circ B)| \le \sqrt{\omega(A^2)\omega(B^2)} \le \|A\|\|B\| \qquad \Rightarrow \qquad \|A \circ B\| \le \|A\|\|B\| .$$

Eine ähnliche Formulierung basiert auf Jordan-Algebren, wo keine Topologie eingeführt wird, aber Distributivität und schwache Assoziativität $A^2 \circ (B \circ A) = (A^2 \circ B) \circ A$ gefordert wird.

Die hier identifizierten Strukturen liefern ein Segal-System, eingeführt in [2] (mit anderen Bezeichnungen):

Definition 1 *Eine Menge $\mathcal{O}$ heißt* Segal-System*, falls gilt*

I.1 $\mathcal{O}$ ist ein reeller Vektorraum.

I.2 $1 \in \mathcal{O}$, und für jedes $A \in \mathcal{O}$ und $n \in \mathbb{N}$ ist $A^n \in \mathcal{O}$ sowie $P(A) \in \mathcal{O}$ für jedes reelle Polynom P in einer Variablen.

II.1 Es gibt eine Norm $\| \ \|$ auf $\mathcal{O}$, bezüglich derer $\mathcal{O}$ ein reeller Banach-Raum wird.

II.2 $\|A^2 - B^2\| \le \max(\|A\|^2, \|B\|^2)$

II.3 $\|A^2\| = \|A\|^2$

II.4 $\| \sum_{A \in \mathcal{R}_1} A^2 \| \le \| \sum_{A \in \mathcal{R}_2} A^2 \|$ *für endliche Teilmengen* $\mathcal{R}_1 \subset \mathcal{R}_2 \subset \mathcal{O}$

II.5 Die Abbildung $A \mapsto A^2$ ist norm-stetig.

Unsere Konstruktion von $\mathcal{O}$ über die Zustände liefert ein solches Segal-System. Zu II.5 ist zu bemerken, daß für $\|A_n - A\| < \epsilon$ gilt

$$\|A_n^2 - A_n\| = \|(A_n - A) \circ (A_n + A)\| \le \|(A_n - A)\|\|A_n + A\| \le \|(A_n - A)\|(\|A_n - A\| + 2\|A\|)$$

Daraus folgt induktiv, daß $A \mapsto A^n$ norm-stetig ist: $A^n = \frac{1}{4}((A + A^{n-1})^2 - (A - A^{n-1})^2)$. Alle anderen Forderungen sind klar. Segal hat in [2] gezeigt, daß dieses System als mathematische Beschreibung der Quantenphysik genügt. Insbesondere konstruiert er die Zustände aus dem Axiomsystem.

Die mathematische Struktur wird jedoch enorm vereinfacht, wenn $\mathcal{O}$ als eingebettet in die Komplexifizierung $\mathcal{A} = \mathcal{O} \otimes_{\mathbb{R}} \mathbb{C}$ betrachtet wird, und für diese folgendes gefordert wird:

1. $\mathcal{A}$ ist mit einem assoziativen, aber nicht notwendig kommutativen Produkt ausgestattet, und für $A, B \in \mathcal{O}$ gilt $A \circ B = \frac{1}{2}(AB + BA)$.

2. Es gibt eine Involution $*$ auf $\mathcal{A}$, und für $A, B \in \mathcal{O}$ und $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$ gilt

$$(\lambda A + \mu B)^* = \bar{\lambda} A + \bar{\mu} B \;, \qquad (AB)^* = BA \;.$$

3. Für beliebige $A \in \mathcal{A}$ ist $A^*A \in \mathcal{O}$ positiv. Die Zustände setzen sich zu $\mathbb{C}$-linearen Funktionalen auf $\mathcal{A}$ fort, erfüllen $\omega(A^*A) \geq 0$ für alle $A \in \mathcal{A}$ und definieren eine Norm $\|A\| := \sup_\omega |\omega(A)|$. Für die Norm gilt

$$\|AB\| \leq \|A\|\|B\| \;, \qquad \|A^*A\| = \|A^*\|\|A\|$$

[Positiviät $\omega((A + \lambda 1)^*(A + \lambda 1)) \geq 0$ liefert $\omega(A^*) = \overline{\omega(A)}$ und damit $\|A^*\| = \|A\|$]

Mit diesen Eigenschaften wird $\mathcal{A}$ zu einer (nichtkommutativen!) C^*-Algebra, und $\mathcal{O} \subset \mathcal{A}$ umfaßt die selbstadjungierten Elemente. Für die Menge $\mathcal{S}$ der physikalischen Zustände wird nur gefordert, daß sie die Elemente von $\mathcal{A}$ separiert; es wird nicht gefordert, daß $\mathcal{S}$ zusammenfällt mit der Menge aller linearen positiven normierten Funktionale auf $\mathcal{A}$. Die Meßwerte haben für normale Elemente $AA^* = A^*A$ eine natürliche Interpretation als Spektrum $\sigma(A)$: Für jedes $\lambda \in \sigma(A)$ gibt es einen Zustand ω mit $\omega(A) = \lambda$.

Literatur

[1] F. Strocchi, "An Introduction to the Mathemaical Structure of Quantum Mechanics," Word Scientific (2005)

[2] I. E. Segal, "Postulates for General Quantum Mechanics," Ann. Math. **48** (1947) 930 verfügbar auf `http://www.jstor.org/stable/1969387`