Didaktik der Physik
Frühjahrstagung Leipzig 2002

Alte und neue Begründungen für die Bornsche Wahrscheinlichkeit

Lutz Polley und Jochen Pade

Fachbereich Physik, Universität Oldenburg, 26111 Oldenburg

Das Betragsquadrat einer Wellenfunktion gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der eine Observable wie der Ort eines Teilchens bei einer Messung einen bestimmten Wert annimmt. Diese Bornsche Regel wurde seit den 30er Jahren mit verschiedenen Argumenten begründet; die bekanntesten Namen in diesem Zusammenhang sind von Neumann (1932) und Gleason (1957). Zwei neue und besonders einfache Begründungen stammen von Deutsch (1999) und von Aharonov und Reznik (2001). Alle Begründungen haben ihre Stärken und Schwächen. Hier soll eine Übersicht gegeben werden.

Messung als Eigenwertproblem

Zu einem physikalischen Meßvorgang gehört ein Apparat, ein Objekt, und als Ergebnis eine Zahl. Bekanntlich werden diese Bausteine in der Quantentheorie zu einem linear-algebraischen Eigenwertproblem zusammengefügt,

$$A\,|v\rangle = \lambda\,|v\rangle \tag{1}$$

wobei dem Apparat ein hermitischer Operator A (eine hermitische lineare Abbildung in einem komplexen linearen Raum) zugeordnet wird, dem Objekt (in einem vorher präparierten Quantenzustand) ein Vektor $|v\rangle$, und dem Meßwert der Eigenwert λ.

Bornsche Regel

Die Bornsche Regel [1] besagt, daß die Wahrscheinlichkeit, ein im Zustand $|\psi\rangle$ präpariertes System im Zustand $|\phi\rangle$ zu finden, gleich dem Betragsquadrat des Skalarprodukts $\langle\phi|\psi\rangle$ ist:

$$w_{\psi\to\phi} = |\langle\phi|\psi\rangle|^2 \tag{2}$$

Äquivalent dazu ist die allgemeine Formel, mit der man in der Quantenmechanik den mittleren Meßwert einer Observablen A in einem reinen Zustand $|\psi\rangle$ berechnet:

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \tag{3}$$

Wir erinnern kurz an den Beweis für diese Äquivalenz. A habe die Eigenvektoren $|i\rangle$ zu den Eigenwerten λ_i, so daß in Diracscher Schreibweise

$$A = \sum_i |i\rangle\lambda_i\langle i| \tag{4}$$

Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Meßwertes λ_i sei p_i. Dann gilt für den Mittelwert

$$\langle A\rangle = \sum_i \lambda_i p_i \tag{5}$$

Setzt man (2) voraus, so ist

$$p_i = |\langle\psi|i\rangle|^2 = \langle\psi|i\rangle\langle i|\psi\rangle \tag{6}$$

und (3) folgt durch Einsetzen von (6) in (5) unter Verwendung von (4). Setzt man umgekehrt (3) voraus, so braucht man nur die Wahrscheinlichkeit für das Auffinden von $|\phi\rangle$ als Erwartungswert einer geeigneten Observablen auszudrücken; diese ist

$$A = |\phi\rangle\langle\phi|$$

denn ihr Meßwert ist $\lambda = 1$ im Zustand $|\phi\rangle$, und $\lambda = 0$ in allen anderen Eigenzuständen. Die Behauptung folgt nun aus $\langle\psi|A|\psi\rangle = |\langle\phi|\psi\rangle|^2$.

Zu (3) wiederum äquivalent ist die Formulierung mit Statistischem Operator ρ,

$$\langle A\rangle = \mathrm{Spur}\,(\rho A) \tag{7}$$

wobei für einen reinen normierten Zustand $|\psi\rangle$

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{8}$$

gesetzt werden muß. Diese Äquivalenz sieht man, indem man die Spur von ρA in einer orthonormalen Basis ausrechnet, deren einer Vektor $|\psi\rangle$ ist.

Die bislang bekannten Erklärungsversuche für die eine oder andere dieser Formulierungen unterscheiden sich nicht nur erheblich im mathematischen Anspruch, sondern vor allem auch in den physikalisch-mathematischen Annahmen, von denen die Autoren ausgehen möchten.

Lineare Erwartungswert-Funktionale

Ein mathematisch sehr befriedigender Zustandsbegriff, den von Neumann eingeführt hat [2], ist der des Erwartungswertfunktionals. Er beruht auf der mathematisch "natürlichen" Gleichsetzung (Isomorphie) von

- Addition von Operatoren als lineare Abbildungen
- Addition von Meßwerten wie bei Auswertung von Meßreihen

Genauer lautet das Postulat: Ist $\langle A\rangle$ der arithmetische Mittelwert aller Meßwerte von A, die in einem Zustand $|\psi\rangle$ gewonnen wurden, so gelte (c = Zahl)

$$\langle A+B\rangle = \langle A\rangle + \langle B\rangle \qquad \langle cA\rangle = c\langle A\rangle \tag{9}$$

für *beliebige* Observable A, B. Gleichungen dieser Form sind auch schon als Präzisierung des Bohrschen Komplementaritätsprinzips angesehen worden [3]. Ihr großes Problem ist, daß bei nichtkommutierenden Observablen völlig unklar sein kann, was die Operatorsumme physikalisch bedeutet (etwa im Sinne einer Bauanleitung für den Meßapparat). Betrachten wir aber nun die Vorteile dieser Auffassung.

Gleichung (9) besagt, daß die Mittelwertbildung eine lineare Abbildung aus dem Raum der Operatoren in den Raum der reellen Zahlen ist. Im endlichdimensionalen Fall ist ein Operator A durch eine $n\times n$-Matrix mit Elementen A_{ik} gegeben, und ein in A linearer Zahlenausdruck (Linearform) hat die allgemeine Form

$$\langle A\rangle = \sum_{i,k=1}^{n} \rho_{ik} A_{ki}$$

mit noch näher zu bestimmenden Zahlenkoeffizienten ρ_{ik}. Man gelangt also bereits im ersten Schritt zu einer Darstellung der Form (7).

Speziell für $A = \mathbf{1}$ = Einheitsmatrix tritt nur die 1 als Meßwert auf, also ist auch der Mittelwert $\langle\mathbf{1}\rangle = 1$, und es folgt

$$\mathrm{Spur}\,\rho = 1 \tag{10}$$

Um zu zeigen, daß ρ hermitisch sein muß, wählen wir eine orthonormale Basis $|1\rangle, \ldots, |n\rangle$, greifen zwei Basisvektoren $|k\rangle$ und $|l\rangle$ heraus, und betrachten die Observablen

$$\begin{aligned} A_+ &= |k\rangle\langle l| + |l\rangle\langle k| \\ A_- &= i|k\rangle\langle l| - i|l\rangle\langle k| \end{aligned} \tag{11}$$

Die Mittelwerte, die reell sein müssen, sind

$$\begin{aligned} \langle A_+\rangle &= \langle l|\rho|k\rangle + \langle k|\rho|l\rangle \\ \langle A_-\rangle &= i\langle l|\rho|k\rangle - i\langle k|\rho|l\rangle \end{aligned} \tag{12}$$

Reellität heißt $\langle A_\pm\rangle = \langle A_\pm\rangle^*$. Addieren wir davon die obere und $\frac{1}{i}$ mal die untere Gleichung, so finden wir

$$\langle k|\rho|l\rangle^* = \langle l|\rho|k\rangle$$

Also ist ρ hermitisch, hat somit eine Eigenbasis, und in dieser die Form

$$\rho = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\, \rho_i\, \langle i| \tag{13}$$

Wäre nun etwa ρ_k negativ, so hätte die Observable $A = |k\rangle\langle k|$ den Mittelwert $\rho_k < 0$ obwohl ihre Meßwerte nur 0 oder 1 sein können; folglich ist $\rho_i \geq 0$ für alle i. Zusammen mit (10) haben wir damit

$$0 \leq \rho_i \leq 1 \qquad \sum_{i=1}^{n} \rho_i = 1 \tag{14}$$

Um die Bornsche Regel herzuleiten, bestimmen wir schließlich die konkrete Form des statistischen Operators für den Fall, daß wir Messungen an einem

Zustand vornehmen, der durch einen Vektor $|\psi\rangle$ im Hilbertraum dargestellt wird. Dazu ergänzen wir $|\psi\rangle$ zu einer orthonormalen Basis $|\psi\rangle, |2\rangle, \ldots, |n\rangle$ und betrachten wieder Observable der Form A_+ und A_- wie in Gleichung (11), jetzt aber mit der Einschränkung $k, l \neq 1$. Zu diesen Observablen ist $|\psi\rangle$ ein Eigenvektor mit Eigenwert null, daher sind die Meßwerte von $A_\pm$ in diesem Zustand definitiv gleich null. Ausgedrückt durch den statistischen Operator bedeutet das, unter Verwendung von (12),

$$\begin{array}{rcl} \langle l|\rho|k\rangle + \langle k|\rho|l\rangle & = & 0 \\ i\langle l|\rho|k\rangle - i\langle k|\rho|l\rangle & = & 0 \end{array} \qquad k, l \neq 1$$

Es folgt $\langle l|\rho|k\rangle = 0$ für alle $k, l \neq 1$. In der Matrixdarstellung bezüglich der gewählten Basis kann ρ also nur noch die Form

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1n} \\ \rho_{12}^* & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{1n}^* & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

haben, wobei die 1 aus (10) folgt. Quadrieren wir diese Matrix, so finden wir einen Widerspruch zu $\mathrm{Spur}\,\rho^2 \leq 1$ welches aus (13) und (14) folgt, außer wenn die Nichtdiagonalelemente $\rho_{12}, \cdots, \rho_{1n}$ verschwinden. In diesem Fall handelt es sich aber um die Matrixdarstellung von $|\psi\rangle\langle\psi|$ in der gewählten Basis, so daß $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. Das ist die Bornsche Regel in der Form (8).

Erwartungswert als Meßwert am Ensemble

Im vergangenen Jahr haben Aharonov und Reznik [4] eine verblüffend einfache Begründung für die Formel (3) gegeben. Zunächst wird festgestellt, daß man eine Meß“reihe” mit einem Quantenzustand $|\psi\rangle$ auch in der Weise gewinnen kann, daß man eine große Zahl N von Systemen gleichzeitig in diesen Zustand bringt und an ihnen jeweils eine Messung von A vornimmt. Das Ensemble dieser gleichartigen Zustandsvektoren befindet sich dann im Produkt-Zustand

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle|\psi\rangle \cdots |\psi\rangle \qquad (N \text{ Faktoren}) \qquad (15)$$

Nun überlegt man, ob es eine Ensemble-Observable $\mathcal{M}$ gibt, die gerade den Mittelwert aller Einzelmessungen von A darstellen würde. Aharonov und Reznik machen dafür den Vorschlag

$$\mathcal{M} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} A_i \qquad (16)$$

wobei A_i die Wirkung des Operators A auf den $i$ten Faktor im Produkt (15) bezeichnet. Aus den Formulierungen in [4] wird deutlich, daß sich die Autoren der Problematik ihrer Annahme vollkommen bewußt sind — wie schon in (9) wird ja in Gleichung (16) wieder die Addition von Meßwerten einer Zahlenkolonne mit der Addition von Operatoren gleichgesetzt. Ein gewisser Fortschritt besteht aber darin, daß in Gleichung (16) alle Operatoren miteinander vertauschen, weil sie alle auf verschiedene Teilsysteme wirken. Wenigstens läßt sich so für *Eigenzustände* von A nachrechnen, daß $\mathcal{M}$ den mittleren Meßwert richtig wiedergibt. Für Nicht-Eigenzustände verbleibt jedoch das gewohnte Unbehagen.

Verblüffend ist aber, wie schnell man von der Annahme (16) zu der Formel (3) gelangt. Für jedes Einzelsystem zerlegt man $A|\psi\rangle$ in einen Anteil parallel zu $|\psi\rangle$ und einen Anteil $|\psi_\perp\rangle$ senkrecht zu $|\psi\rangle$. Die parallele Komponente ist die Projektion von $A|\psi\rangle$ in Richtung von $|\psi\rangle$, also gegeben durch das Skalarprodukt $\langle\psi|A|\psi\rangle$. Somit gilt

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle + |\psi_\perp\rangle \qquad \lambda = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

Beim Einsetzen in den Produktvektor (15) wirken sich nun die parallele und die senkrechte Komponente sehr unterschiedlich aus. Die parallele Komponente reproduziert das Produkt insgesamt, und gibt nur einen Vorfaktor $\langle\psi|A|\psi\rangle$. Die senkrechte Komponente bei der Anwendung von A auf den $i$ten Faktor gibt dagegen

$$|\psi\rangle \cdots |\psi\rangle|\psi_\perp\rangle|\psi\rangle \cdots |\psi\rangle$$

mit $|\psi_\perp\rangle$ an der $i$ten Stelle. In der Summe über i mit anschließender Division durch N geben die parallelen Komponenten zusammen den alten Produktzustand mit einem Vorfaktor $\langle\psi|A|\psi\rangle$. Die senkrechten

Komponenten sind dagegen auch zueinander senkrecht; zur Illustration etwa die ersten beiden Terme aus der Summe (16):

$$|\psi_\perp\rangle|\psi\rangle\cdots|\psi\rangle$$
$$|\psi\rangle|\psi_\perp\rangle\cdots|\psi\rangle$$

Nach dem Satz des Pythagoras in N Dimensionen addieren sich N senkrechte Einheitsvektoren zu einem Vektor der Länge $\sqrt{N}$; nach Division durch N gemäß (16) geht dieser Anteil somit im Limes $N \to \infty$ gegen den Nullvektor. Damit haben wir in diesem Limes

$$\mathcal{M}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \qquad\qquad \lambda = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

Die Formel (3) läßt sich also damit begründen, daß $\langle\psi|A|\psi\rangle$ als Meßwert im Sinne der Eigenwertgleichung (1) bei Messung der Mittelwert-Observablen $\mathcal{M}$ an einem sehr großen Ensemble auftritt.

Das Theorem von Gleason

Ein in der mathematischen Physik gefeiertes Theorem, das die Bornsche Regel tatsächlich direkt aus (1) herleitet, wurde 1957 von Gleason [5] bewiesen. Eine elementarisierte Form des Beweises, die sich allerdings über 12 Seiten erstreckt, wurde 1985 von Cooke et al. [6] gegeben. Ein Beweis-Beispiel für den 3-dimensionalen anschaulichen Raum, das immerhin noch die Theorie der Kugelflächenfunktionen benötigt, findet man in dem Lehrbuch von Peres [7].

Das Theorem von Gleason läßt sich folgendermaßen formulieren: Will man jedem Vektor v eines Vektorraums eine Wahrscheinlichkeit $p(v)$ zuordnen, so daß für jede orthonormale Basis $v_1, \ldots, v_n$ die Summe der Wahrscheinlichkeiten $p(v_i)$ gleich 1 ist, dann ist die Bornsche Regel die einzige Möglichkeit; das heißt, es ist $p(v) = |\langle v|w\rangle|^2$ für alle v mit einem festem Vektor w.

Das Theorem macht eine rein geometrische Aussage, die nicht primär mit Statistik zu tun hat; statt von “Wahrscheinlichkeiten” ist in der einschlägigen Literatur von “frame functions” (Basissystem-Funktionen) die Rede. Physikalisch ist aber klar, daß das Theorem eine unmittelbare Bedeutung für Übergangswahrscheinlichkeiten aus einem präparierten Zustand $|w\rangle$ in alle möglichen Detektor-Zustände $|v\rangle$ hat.

Die Normierungsbedingung $\sum_i p(v_i) = 1$ für die Summe über eine beliebige Basis hat folgenden Grund: An einem Zustandsvektor w kann man jede beliebige Observable A messen; findet man dabei den Eigenwert λ_i (vgl. (1)) so ist das System in den zugehörigen Eigenvektor von A übergegangen, hier v_i genannt. Da immer eines der Meßergebnisse auftreten muß, ist die Summe der Wahrscheinlichkeiten $p(v_i)$ gleich 1. Auf den Zahlenwert von λ_i kommt es dabei nicht an, sondern nur auf die Unterscheidbarkeit der Eigenvektoren. Nun gibt es zu jedem A eine Basis aus Eigenvektoren, und umgekehrt ist jede orthonormale Basis auch Eigenbasis einer geeigneten Observablen. Daher ist im Theorem von Gleason die Rede von Basen und nicht von Observablen.

Herleitung aus Superposition & Symmetrie

Eine Begründung der Bornschen Regel, die nur Superpositionen von Zustandsvektoren und nicht solche von “Apparaten” benutzt, findet sich in einer Arbeit von Deutsch [8], die 1999 publiziert wurde. DeWitt [9] hat diese Begründung als (sinngemäß) “das Beste was es dazu bisher gibt” bezeichnet.

Deutsch betrachtet eine Superposition von der speziellen Form

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{m}{m+n}}\;|A\rangle + \sqrt{\frac{n}{m+n}}\;|B\rangle \tag{17}$$

Hierbei sind $|A\rangle$ und $|B\rangle$ zwei orthonormale Vektoren; $|\psi\rangle$ ist automatisch ebenfalls normiert. m und n sind natürliche Zahlen, so daß die Koeffizienten Wurzeln aus rationalen Zahlen sind; damit lassen sich reell-positive Koeffizienten beliebig genau approximieren. Zusätzliche komplexe Phasenfaktoren in den Koeffizienten könnte man für den gegenwärtigen Zweck in $|A\rangle$ und $|B\rangle$ absorbieren.

Deutsch zeigt nun, daß die Bornsche Wahrscheinlichkeitsregel für das Vorfinden von A oder B aus dem *Prinzip des fehlenden Grundes* folgt. Man kennt dieses Prinzip aus der Theorie des Würfelns: Da es keinen Grund gibt, weshalb eine der sechs Flächen häufiger als eine andere auftreten sollte, müssen alle Flächen mit derselben Wahrscheinlichkeit $w = 1/6$ auftreten.

Wir denken uns nun das Quantensystem im Zustand A um ein "Hilfssystem" erweitert, das einen m-dimensionalen Zustandsraum hat; analog das System im Zustand B um ein "Hilfssystem" mit einem n-dimensionalen Zustandsraum. Konkret könnten etwa die Zustände A und B den Spin-Einstellungen eines Teilchens entsprechen, und die Zustände der Hilfssysteme gewissen Orten des Teilchens. Mit den Hilfssystemen wird eine Art von "Quantenwürfel" mit $m + n$ Flächen eingeführt. Um, bildlich gesprochen, gleiche Wahrscheinlichkeiten für die Flächen zu erreichen, versetzen wir die Hilfssysteme in spezielle Überlagerungszustände, in denen alle Koeffizienten *gleich* sind. Aus Normierungsgründen muß dann der gemeinsame Koeffizient im Hilfssystem A gleich $\sqrt{1/m}$ sein, und im Hilfssystem B gleich $\sqrt{1/n}$. Somit bedeutet das Einführen der Hilfssysteme die folgenden Ersetzungen:

$$\begin{aligned} |A\rangle \quad &\rightarrow \quad |A\rangle|\alpha\rangle = |A\rangle\sqrt{\frac{1}{m}}\sum_{i=1}^{m}|i\rangle \\ |B\rangle \quad &\rightarrow \quad |B\rangle|\beta\rangle = |B\rangle\sqrt{\frac{1}{n}}\sum_{i=m+1}^{m+n}|i\rangle \end{aligned} \tag{18}$$

Der urspüngliche Zustand (17) wird dadurch sehr wohl verändert, aber die Eigenschaften A und B werden nicht angerührt. Lediglich wird eine Strecke von z.B. der Länge $\sqrt{m}$ durch einen höherdimensionalen Polygonzug aus m gleich großen und zueinander senkrechten Streckenelementen dargestellt. Der Punkt ist nun, daß in der zunächst unsymmetrischen Superposition (17) nach den Ersetzungen (18) *lauter gleiche Koeffizienten* auftreten (nämlich $1/\sqrt{m+n}$). Damit gibt es keinen Grund mehr, weshalb bei einer Messung an dem Gesamt-System (ursprüngliches System + Hilfs-Systeme) einer der Gesamt-Basiszustände häufiger als ein anderer auftreten sollte. Die Wahrscheinlichkeiten müssen also alle gleich $\frac{1}{m+n}$ sein. Da die Eigenschaften A und B in den Gesamt-Basiszuständen noch präsent sind, braucht man nur noch abzuzählen um zu finden, daß das Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten $w_A : w_B$ gleich $m : n$ ist, wie es die Bornsche Regel verlangt.

In (18) kommt es wesentlich darauf an, daß ein *im üblichen Sinne* normierter Überlagerungszustand des Hilfssystems verwendet wird. Diese übliche Normierung von Wellenfunktionen (mag sie auch "natürlich" [9] erscheinen) wird in der Lehrbuchliteratur stets mit der Bornschen Wahrscheinlichkeitsregel begründet. Obwohl das Argument von Deutsch sicher zum Verständnis der Bornschen Regel beitragen kann, enthält es in der publizierten Form möglicherweise einen logischen Zirkel.

Literatur

[1] M. Born, Z. Phys. **37** (1926) 863.

[2] J. von Neumann, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* (Springer, Berlin, 1932).

[3] A. Bohr, O. Ulfbeck, Rev. Mod. Phys. **67** (1995) 1.

[4] Yakir Aharonov und Benni Reznik, *How macroscopic properties dictate microscopic probabilities*, http://arXiv.org/abs/quant-ph/0110093.

[5] A. M. Gleason, J. Math. Mech. **6** (1957) 885.

[6] R. Cooke et al., Math. Proc. Camb. Phil. Soc. **98** (1985) 117.

[7] A. Peres, *Quantum Theory: Concepts and Methods* (Kluwer, Dordrecht, 1995).

[8] D. Deutsch, Proc. Roy. Soc. Lond. A **455** (1999) 3129.

[9] B. DeWitt, Int. J. Mod. Phys. A **13** (1998) 1881.