Seminar Kern- und Teilchenphysik
Quantenmechanik und klassisches Regime

F. Beyer

31. Oktober 2001

Seit Ihren Anfängen ist die Physik auf der Suche nach der fundamentalen Theorie – die Theorie, die zur Beschreibung jedes Phänomens in der Natur angemessen ist. Bis zum Anfang des 20. Jahrhunderts glaubte man, die klassische Physik hätte diese Bedeutung; sie versagt aber bei vielen mikroskopischen Systemen, was die Entwicklung der Quantenmechanik verursachte. Bis heute ist jene aber niemals direkt an makroskopischen Systemen getestet worden; mit Billard-Kugeln konnten z.B. noch keine Interferenzversuche durchgeführt werden. Wenn wir aber die Quantenmechanik in ihrer üblichen Form als fundamentale Theorie akzeptieren sollen, so müssen wir zumindest fordern, dass sie in der makroskopischen Welt dieselben Vorhersagen wie die dort gültige klassische Mechanik macht. Daher ist es sinnvoll, sich mit dem klassischen Grenzfall der Quantenmechanik auseinanderzusetzen.

1 Neues in der Quantenmechanik

In der Quantenmechanik gibt es viele Konzepte, die nicht in der klassischen Physik begründet liegen bzw. ihr sogar widersprechen. Das ist insbesondere das **Komplementaritätsprinzip**, welches besagt, dass zu einer vollständigen Beschreibung eines quantenmechanischen Sachverhalts zwei sich gegenseitig ausschließende Sachverhalte der klassischen Vorstellung zusammengenommen werden müssen: z.B. der **Welle-Teilchen-Dualismus**. Dieses führt insbesondere zur **Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation**, welche in der einfachsten Fassung

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

lautet. Die Unschärfen sind prinzipieller Natur und in der statistische Deutung der Quantenmechanik begründet.

2 Forderungen an den klassischen Grenzfall

Jedes klassische System unterliegt der Dynamik, die durch die **Newtonschen Bewegungsgleichungen** bzw. äquivalenten Formulierungen beschrieben wird. In der Quantenmechanik ist dafür die **Schrödingergleichung** verantwortlich. Wir fordern also im klassischen Grenzfall als erstes einen Übergang der Schrödingergleichung in die Newtonschen Gleichungen.

Weiterhin existiert in der klassischen Mechanik die Vorstellung von der **Teilchentrajektorie**. Diese ist dadurch gekennzeichnet, dass zu jedem Zeitpunkt der Ort und der Impuls eines Teilchens im Prinzip exakt bestimmbar sind. Die universelle Gültigkeit der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation vorausgesetzt, ist dieses im strengen Sinne aber verboten. Für den klassischen Grenzfall können wir also nicht den streng mathematischen Übergang der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen in klassische Trajektorien verlangen, sondern wir fordern als zweites den sog. *physikalisch sinnvollen* Übergang. "Physikalisch sinnvoll" bedeutet, dass Orts- und Impulsunschärfen nicht streng mathematisch verschwinden müssen, sondern nur klein gegenüber typischen Größen des betrachteten Systems und somit unmessbar werden müssen. Für Systeme wie die Billard-Kugel oder das schnelle Elektron in der Nebelkammer ist dieses gut erfüllt. In all diesen Systemen sind typische Wirkungen groß gegenüber $\hbar$. Wenn man in der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation $\hbar$ als kleine Größe ansieht und als klassischen Grenzfall gegen null gehen lässt, so werden ebenfalls klassische Teilchentrajektorien in diesem Sinne möglich. Eine große Wirkung gegenüber $\hbar$ wird insbesondere bei hohen Quantenzahlen erreicht, z.B. ist bei hohen Energien die Energiequantelung des harmonischen Oszillators nicht mehr feststellbar, und er verhält sich, als wäre er klassisch.

Die Forderung nach dem Verschwinden der Unschärfen im klassischen Grenzfall umfasst aber nur eine spezielle Gruppe von makroskopischen Systemen. Im allgemeinen kann diese Forderung nicht aufgestellt werden, denn der quantenmechanische Indeterminismus bleibt in vielen makroskopischen Systemen erhalten. Dazu betrachte man Abb. 1. Ein Fo-

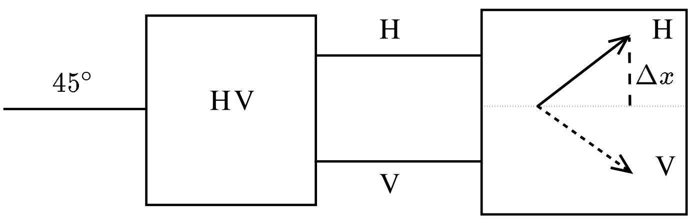

Abb. 1: Experiment zur Messung der Fotonenpolarisation

tonenstrahl trifft auf einen doppelbrechenden Kristall, der den Strahl in zwei Teilstrahlen aufteilt, die als Horizontal- oder H-Kanal und Vertikal- oder V-Kanal bezeichnet werden. Sind die Fotonen zu Beginn 45° relativ zur H-Richtung polarisiert, so ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Foton durch den H- bzw. V-Kanal geht, jeweils 50%. Schaltet man an die Kanäle nun ein Messgerät mit einem makroskopischen Zeiger, der nach oben zeigt, wenn das Foton durch den H-Kanal gegangen ist, und nach unten im anderen Falle, so wird man bei jedem Foton, das in die Anordnung gerät, eine andere Zeigerstellung messen. Die Ortsunschärfe der Zeigerspitze ist nicht verschwindend, obwohl der Zeiger ein klassisches System ist. Er selbst bewegt sich auf klassischen Trajektorien, denn man kann jeder Auslenkung genau ein Drehmoment zuordnen. Wir halten demnach folgendes fest: im allgemeinen handelt es sich beim klassischen Grenzfall nicht um **eine** klassische Trajektorie, sondern um ein **Ensemble** von Trajektorien – im Beispiel sind es zwei: die Aufwärts- und die Abwärtsrichtung des Zeigers, über deren Auswahl nur statistische Aussagen gemacht werden können. Es ist eine Art **statistische Mechanik**, die nicht zu verwechseln ist mit der klassischen Thermodynamik. Der prinzipielle Indeterminismus der Quantenmechanik bleibt im allgemeinen in der Makrowelt erhalten.

3 Das Ehrenfest-Theorem

Nach dem wir eine Vorstellung vom klassischen Grenzfall gewonnen haben, wollen ihn mit einem konkreten Ansatz untersuchen. Der Ansatz heißt **Ehrenfest-Theorem**, welches direkt aus der Schrödingergleichung und den Heisenbergschen Vertauschungsrelationen abgeleitet wird. Es lautet

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{x}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\vec{x},H]\rangle = \frac{\langle\vec{p}\rangle}{m}$$
$$\frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\vec{p},H]\rangle = -\left\langle\frac{\partial V(\vec{x})}{\partial\vec{x}}\right\rangle.$$

Die erste der beiden Gleichungen stimmt direkt mit der entsprechenden klassischen überein, wenn man die Erwartungswerte der Observablen mit den klassischen Werten der Observablen identifiziert. Die zweite ist im allgemeinen nicht gleich der Newtonschen Bewegungsgleichung. Erst wenn wir $\Delta x \to 0$ gehen lassen, erhalten wir diese (Beisp. eindimensional)

$$\left\langle\frac{dV(x)}{dx}\right\rangle = \int dx\psi^*(x)\frac{dV(x)}{dx}\psi(x) = \int dx\frac{dV(x)}{dx}|\psi(x)|^2$$
$$\xrightarrow{\Delta x\to 0} \int dx\delta(x-\langle x\rangle)\frac{dV(x)}{dx} = \frac{dV(\langle x\rangle)}{dx}.$$

Der Grenzübergang ist wieder als ein *physikalisch sinnvoller* zu betrachten. Wir verkleinern Δx so lange, bis es schon unmessbar und Δp gerade noch unmessbar ist.

Ein Problem tut sich jedoch sofort auf. Selbst freie Wellenpakete haben die Eigenschaft, breit zu fließen. Ein sich am Anfang genügend scharfes Wellenpaket, also ein klassisches Teilchen bewegt sich auf einer klassischen Trajektorie. Nach einiger Zeit wird es breitfließen und wegen des Ehrenfest-Theorems immer weiter davon abweichen. Typische Zeiträume dafür sind aber unnachweisbar groß. Z.B. ein freies Teilchen (Gaußpaket) mit der Masse 1 g, $\Delta x(t=0) = 10^{-15}$ m hat erst nach 300000 Jahren eine Ortsunschärfe von 1 mm. Dieses Problem ist also rein akademischer Natur.

Das Ehrenfest-Theorem versagt aber bei Systemen wie der Zeiger in der Messapperatur aus Abb. 1. Der Erwartungswert alleine enthält für solche Systeme nicht die wesentlichen Informationen. Es besagt, dass sich der Erwartungswert der Zeigerstellung nicht auf einer klassischen Trajektorie bewegt. Das ist korrekt, denn der Erwartungswert der Zeigerstellung bei diesem System ist immer null, unabhängig davon, welche Drehmomente auf den Zeiger wirken. Der Erwartungswert der Zeigerstellung stimmt praktisch nie mit der wirklichen Zeigerstellung überein. Es ist also im allgemeinen zur Beschreibung von Systemen im klassischen Grenzfall nicht ausreichend, nur Erwartungswerte zu betrachten, sondern wir müssen vielmehr die kompletten Wahrscheinlichkeitsverteilungen untersuchen.

4 Hamilton-Jacobi-Ansatz

Der nun vorzustellene Ansatz wurde 1954 von David Bohm verwendet, um seine Interpretation der Quantenmechanik mit versteckten Parametern aufzustellen. Da es darüber eine eigene Ausarbeitung geben wird, werden hier keine Rechnungen durchgeführt. Man macht folgenden allgemeinen Ansatz für die Wellenfunktion

$$\psi(\vec{x},t) = A(\vec{x},t)\,e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x},t)} \quad \text{mit} \quad A,S:\mathbb{R}^4 \longrightarrow \mathbb{R}.$$

Dieses wird in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt. Nach einiger Rechnung und Auftrennung von Real- und Imaginärteil erhält man

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \vec{j} + \frac{\partial P}{\partial t} &= 0 \\
\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V + V_Q + \frac{\partial S}{\partial t} &= 0
\end{aligned}$$

mit

$$P = A^2 \qquad \textbf{Wahrscheinlichkeitsdichte}$$

$$\vec{j} = \frac{P\nabla S}{m} \qquad \textbf{Wahrscheinlichkeitsstrom}$$

$$V_Q = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta A}{A} \qquad \textbf{Quantenpotential}.$$

Die Interpretation der ersten Gleichung ist klar: wegen der Erhaltung von Wahrscheinlichkeiten handelt es sich um die Kontinuitätsgleichung.

Die zweite Gleichung entspricht der klassischen **Hamilton-Jacobi-Gleichung** genau dann, wenn $V_Q = 0$. Diese ist im allgemeinen von folgender Gestalt

$$H(\vec{q}, \vec{p} = \nabla S, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

und ist eine Bestimmungsgleichung für die Funktion S, die die **Wirkungsfunktion** darstellt. $H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ ist die klassische Hamilton-Funktion in Abhängigkeit von den generalisierten Koordinaten $\vec{q}$, dem kanonisch konjugierten Impuls $\vec{p}$ und der Zeit t.

Auch hier können wir formal einen **Wahrscheinlichkeitsimpuls** definieren

$$\vec{p} = m\vec{v} = m\frac{\vec{j}}{P} = \nabla S$$

und stimmt mit dem Impuls in der klassischen Hamilton-Jacobi-Gleichung überein. Wir können also festhalten: genau dann, wenn das Quantenpotential V_Q verschwindet, fließen die Wahrscheinlichkeiten auf klassischen Trajektorien. Das unterstützt die Forderung, die wir oben für den klassischen Grenzfall aufgestellt haben. Darin folgt das Teilchen einer klassischen Trajektorie aus einem Ensemble von solchen. Welche daraus ausgewählt wird, entscheidet der Zufall. Damit wird – im Gegensatz zum Ehrenfest-Theorem – das System aus Abb. 1 beschreibbar.

Verschwindet das Quantenpotential auch wirklich bei Systemen, von denen wir den klassischen Grenzfall erwarten? Man betrachte dazu bespielhaft ein freies eindimensionales ruhendes Gaußpaket

$$A(\vec{x}, t) = \psi_0 \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma}\right)^2\right).$$

Dann ist das Quantenpotential

$$V_Q = -\frac{\hbar^2}{2m\sigma^2}\left(\frac{x^2}{\sigma^2} - 1\right).$$

Sind typische Systemwirkungen groß gegenüber $\hbar$, so kann das Quantenpotential vernachlässigt werden, da es proportional zu $\hbar$ ist. Es verschwindet aber auch bei $\sigma \to \infty$, d.h. bei einem breitem Wellenpaket. Das unterstützt wieder die Behauptung, dass der statistische Charakter der Quantenmechanik auch aus klassisch makroskopischen Systemen im allgemeinen nicht wegzudenken ist.

5 WKB-Methode

Wir haben oben für klassische Systeme gefordert, dass $\hbar$ im Vergleich zu typischen Wirkungen eine kleine Größe ist. Dann gehorchen diese den Gesetzen der statistischen klassischen Mechanik. Trotzdem werden viele solcher Systeme durch gewisse Quanteneigenschaften charakterisiert, weshalb wir nicht wie oben alle Terme mit $\hbar$ – z.B. das Quantenpotential im Falle eines Gaußpakets – vernachlässigen können. Die **WKB-Methode** nach WENTZEL, KRAMERS UND BRILLOUIN nimmt die niedrigsten Terme in $\hbar$ mit und ermöglicht die näherungsweise Berechnung der Wellenfunktion. Für diese Systeme im klassischen Regime behält man die Begriffe und Vorstellungen der Quantenmechanik bei, weshalb man vom **quasi-klassischen Grenzfall** spricht. Ein Beispiel ist der α-Zerfall, wobei Objekte großer Masse und Energie beteiligt sind. Trotzdem ist dafür der quantenmechanische Tunneleffekt entscheidend.

Wir wollen uns auf das eindimensionale Problem eines Teilchens beschränken. Außerdem soll es sich um ein autonomes System handeln, d.h. $\partial H/\partial t = 0$. Somit kann der zeitliche Teil der Wellenfunktion absepariert werden und es muss nur noch die zeitunabhängige Schrödingergleichung betrachtet werden. Man macht folgenden allgemeinen Ansatz

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\sigma(x)\right) \quad \text{mit} \quad \sigma : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$$

und setzt dieses in die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (V(x) - E)\psi(x) = 0$$

ein. Eine kurze Nebenrechnung ergibt

$$0 = -\frac{i\hbar}{2m}\sigma'' + \frac{1}{2m}{\sigma'}^2 + V - E, \tag{1}$$

wobei der Strich die Ableitung nach dem Ort symbolisiert. In Analogie zum Hamilton-Jacobi-Ansatz wird die Funktion σ im klassischen Grenzfall mit der Wirkungsfunktion im Zusammenhang stehen. Insbesondere wird ihr Realteil gerade gleich der Wirkungsfunktion sein. Da die Wirkung groß gegenüber $\hbar$ sein soll, macht es demnach Sinn σ nach $\hbar$ zu entwickeln

$$\sigma(x) = \sigma_0(x) + \hbar\sigma_1(x) + \hbar^2\sigma_2(x) + \ldots .$$

Dieses wird eingesetzt, und man erhält

$$\begin{aligned} 0 = &-\frac{i\hbar}{2m}\left[\sigma_0'' + \hbar\sigma_1'' + \hbar^2\sigma_2'' + \ldots\right] \\ &+ \frac{1}{2m}\left[\sigma_0' + \hbar\sigma_1' + \hbar^2\sigma_2' + \ldots\right]^2 + V - E. \end{aligned}$$

Man ordnet nun nach Potenzen von $\hbar$

$$\frac{1}{2m}{\sigma_0'}^2 + \hbar\left[2\frac{1}{2m}\sigma_0'\sigma_1' - \frac{i}{2m}\sigma_0''\right] + \ldots = E - V. \tag{2}$$

In einer ersten Näherung vernachlässigen wir alle Terme mit $\hbar$ und höheren Ordnungen, so dass nur noch folgende einfache Differentialgleichung zu lösen bleibt

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2m}{\sigma_0'}^2 = E - V \\
\Rightarrow \quad &\sigma_0' = \pm\sqrt{2m(E-V)} = \pm p \\
\Rightarrow \quad &\sigma_0 = \pm \int \sqrt{2m(E-V(x'))}\, dx' = \pm \int p(x')\, dx' \\
\Rightarrow \quad \psi(x) =& C_1 \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int^x p(x')\, dx'\right) + C_2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int^x p(x')\, dx'\right).
\end{aligned}$$

Das ist sehr gut zu verstehen, wenn man die De-Broglie-Beziehung $\hbar k$ einsetzt, so dass das Integral im Exponenten die gesamte vom Teilchen durchlaufene Phase darstellt. Diese Näherung ist aber nur im Falle hoher Impulse sinnvoll, denn k kann nicht wirklich punktweise definiert werden. Die Näherung ist nur dann gültig, wenn

$$1 \gg \frac{\hbar\sigma''}{\sigma'^2} = \frac{d}{dx}\frac{\hbar}{\sigma'} \approx \frac{d}{dx}\frac{\hbar}{p} \sim \frac{d\lambda}{dx},$$

da wir in der ersten Näherung $\hbar\sigma''$ gegenüber σ'^2 in Gl. (1) vernachlässigt haben.

Zur Berechnung einer zweiten Näherung gehen wir iterativ vor. Wir sehen die erste Näherung als gültig an und setzen dieses wieder in Gl. (2) ein. Diesmal werden nur Terme bis zur ersten Ordnung in $\hbar$ berücksichtigt. Es folgt

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{1}{m}\sigma_0'\sigma_1' - \frac{i}{2m}\sigma_0'' \quad \Rightarrow \quad 0 = \pm p\sigma_1' \mp \frac{i}{2}p' \\
\Rightarrow \quad \sigma_1' &= \frac{i}{2}\frac{p'}{p} \quad \Rightarrow \quad \sigma_1 = \frac{i}{2}\ln p = i \ln\sqrt{p} \\
\Rightarrow \quad \sigma &= \pm \int p(x')\, dx' + i\hbar \ln\sqrt{p} \\
\Rightarrow \quad \psi(x) &= \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int^x p(x')\, dx'\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int^x p(x')\, dx'\right).
\end{aligned}$$

Auch dieses kann physikalisch gut nachvollzogen werden. Schließlich ist die Wahrscheinlichkeit $|\psi|^2$, ein Teilchen in einem Raumbereich zu finden, proportional zur Zeit, die es dort verbringt. Die Verweilzeit ist aber antiproportional zum Teilchenimpuls. Geht man von $|\psi|^2$ zu ψ selbst über, so ergibt sich der $p^{-1/2}$-Faktor.

Insgesamt kann – bis auf Raumbereiche mit klassischen Umkehrpunkten, d.h. $p \to 0$ – hiermit die Wellenfunktion mit der Formel

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$$

berechnet werden, wenn das Potential $V(x)$ bekannt ist.

Literaturangaben

Ballentine, Quantum Mechanics, Kap. 15
Shankar, Principles of Quantum Mechanics, Kap. 6, 16.2
Rae, Quantenphysik: Illusion oder Realität
Landau/Lifschitz, Quantenmechanik, Kap. VII