Das Unschärfeprodukt $\Delta x \cdot \Delta p$ in der klassischen Mechanik

Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie

Westfälische Wilhelms-Universität Münster

Jonas Lübke

27. November 2013

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung

Die folgende Arbeit ist im Zuge des Seminars zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie entstanden und ist eine Verschriftlichung eines Vortrages. Sie behandelt das Vorkommen von Unschärfen in der klassischen Mechanik und vergleicht diese mit den Unschärfen der Quantenmechanik.

Sie basiert hauptsächlich auf der Veröffentlichung "The uncertainty product of position and momentum in classical dynamics"von A.R. Usha Devi und H.S. Karthik aus dem Jahre 2012.

1 Einführung

Diese Ausarbeitung beschäftigt sich mit zweierlei: Zum einen mit der Beziehung zwischen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik und zum anderen mit Unschärfen in der klass. Mechanik.
Mit der Quantenmechanik lassen sich mikroskopische Phänomene in Größenordnung von Atomen, sowie makroskopische Systeme die unseren Alltag betreffen, beschreiben. Die klassische Mechanik hat ihre Grenzen. Sie ist eine gute Näherung für makroskopische Systeme, kann aber falsch werden für mikroskopische Systeme. Daher lässt sich die klassische Mechanik als Grenzfall der Quantenmechanik auffassen. Die spannende Frage ist nun, wie diese Grenzfälle aussehen und wo man diese findet.
Diese Ausarbeitung konzentriert sich auf einen besonderen Berührpunkt beider Theorien: Die Unschärfe. Nun sind Physiker Unschärfen in quantenmechanischen Systemen gewohnt, im Gegensatz zu Unschärfen in klassischen Systemen. Wo und wie man diese Unschärfen in klass. Systemen finden kann, wird im Folgenden erläutert.

2 Beziehung zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik

2.1 Grenzfälle

Es existieren verschiedene Möglichkeiten, von der Quantenmechanik in die klassische Mechanik überzugehen.

Ein Beispiel ist das **Ehrenfest-Theorem**.
Auf dieses wird im nächsten Abschnitt näher eingegangen.

2.2 Ehrenfest-Theorem

Die mathematische Formulierung des Ehrenfest-Theorems für den Erwartungswert eines beliebigen Operators O hat folgende Gestalt:

$$\frac{d}{dt}\langle O\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H,O]\rangle + \left\langle \frac{\partial O}{\partial t}\right\rangle \tag{1}$$

und lässt sich einfach herleiten:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle O\rangle = \frac{d}{dt}\int \Psi^* O \Psi dV &= \int \left[\left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\right) O\Psi + \Psi^*\left(\frac{\partial O}{\partial t}\right)\Psi + \Psi^* O\left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right)\right] dV &(2)\\ &= \int \left[\left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\right) O\Psi + \Psi^* O\left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right)\right] dV + \left\langle \frac{\partial O}{\partial t}\right\rangle &(3)\end{aligned}$$

mit Hilfe der Schrödingergleichung und der Hermitizität des Hamiltonoperators folgt: $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}H\Psi$ und $\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\Psi^* H$
Eingesetzt:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle O\rangle &= \frac{i}{\hbar}\int [\Psi^* H O\Psi - \Psi^* O H\Psi] dV + \left\langle \frac{\partial O}{\partial t}\right\rangle &(4)\\ &= \frac{i}{\hbar}\langle [H,O]\rangle + \left\langle \frac{\partial O}{\partial t}\right\rangle &(5)\end{aligned}$$

Für ein System mit Hamiltonoperator $H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ gilt:

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m} \tag{6}$$

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = -\left\langle\frac{dV(\hat{x})}{dx}\right\rangle \tag{7}$$

$$\Rightarrow \frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = \langle F(\hat{x})\rangle \tag{8}$$

Es gilt für lineare und quadratische Potentiale $\langle F(\hat{x})\rangle = F(\langle\hat{x}\rangle)$, dies ist aber nicht allgemein gültig. Dadurch lässt sich mit Hilfe des Ehrenfesttheorems eine klassische Bewegungsgleichung herleiten, die dem 2. Newton'schen Axiom entspricht. In Worten gefasst bedeutet dies, dass sich der Erwartungswert der Position eines Teilchens auf einer klassischen Bahn bewegt.
Jedoch:Für stationäre Zustände in Systemen mit Symmetrie $x \leftrightarrow -x$ sind $\langle\hat{x}\rangle$ und $\langle\hat{p}\rangle$ null! Also erhält man mit Hilfe des Ehrenfest-Theorems keinerlei nützliche Information über solche Systeme.

2.3 Unschärfen

Nun sollen also die Unschärfen als Berührpunkt der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik für stationäre Systeme betrachtet werden.
Das Heisenbergsche Unschärfetheorem wurde 1927 von Werner Heisenberg formuliert. Es besagt, dass z.B. Ort und Impuls eines Teilchens gleichzeitig nicht beliebig scharf bestimmbar sind.

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{9}$$

Es besteht also ein gewisses "Trade-off" Prinzip zwischen beiden Größen: Je genauer der Ort des Teilchens bestimmt wird, desto ungenauer wird sein Impuls und umgekehrt.

3 Unschärfen in der klass. Mechanik

Im Folgenden werden Bedingungen formuliert, unter denen Unschärfen in der klass. Mechanik zu finden sind.
Dann werden die klass. Unschärfen mit den quantenmechanischen verglichen, um die neuen Grenzfälle zu identifizieren.
Betrachtet man die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Position x eines einzelnen Teilchens:

$$P_{CL}^{single}(x,t) = \delta[x - x(t)] \tag{10}$$

$\rightarrow$ Keine Unschärfe!
Dieses Ergebnis war zu erwarten, da in der klassischen Mechanik Ort und Impuls eines Teilchens beliebig genau bestimmbar sind.
Es gilt also eine Voraussetzung zu schaffen, in der Unschärfe in einem klass. System zu finden ist. Dies lässt sich durch die Betrachtung eines Teilchenensembles mit gleicher konstanter Energie, aber unterschiedlicher

Anfangspositionen bzw. Anfangsbedingungen erreichen.
Für dieses Ensemble gilt:

$$P_{CL}(x,p) \propto \delta\left[\frac{p^2}{2m} + V(x) - E\right] \tag{11}$$

Für diese Phasenraum-Wahrscheinlichkeitsverteilung des Ensembles gilt die Liouville-Gleichung:

$$\frac{dP_{CL}(x,p)}{dt} = \{P_{CL}(x,p),H\} = 0 \tag{12}$$

Dabei ist $\{...\}$ die Poisson-Klammer.
Da die Unschärfe über Varianzen berechnet werden soll, benötigen wir die Erwartungswerte $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$, sowie $\langle p\rangle$ und $\langle p^2\rangle$. Dazu wird über $P_{CL}(x,p)$ über p integriert, um Wahrscheinlichkeitsfunktion für Position x zu erhalten:

$$\begin{aligned}
P_{CL}(x) &= \int dp P_{CL}(x,p) = const. \cdot \int dp\delta\left[\frac{p^2}{2m} + V(x) - E\right] && (13)\\
&= const. \cdot \int dp 2m\delta(p^2 + 2m\left[V(x) - E\right]) && (14)\\
&= const. \cdot \sqrt{\frac{2m}{[E - V(x)]}} \cdot \int dp\left[\delta(p + \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]}) + \delta(p - \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]})\right] && (15)\\
&= \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{E - V(x)}} && (16)
\end{aligned}$$

Diese Wahrscheinlichkeitsfunktion gilt nur im klass. erlaubten Gebiet $E \geq V(x)$ und ist ansonsten null!
$\mathcal{N}$ stellt hier einen Normierungsfaktor dar, der so gewählt ist, dass das Integral über die Wahrscheinlichkeitsfunktion in dem klassisch erlaubten Gebiet auf 1 normiert ist, da sich das Teilchen irgendwo innerhalb dieses Bereiches aufhalten muss.
Mit der Wahrscheinlichkeitsfunktion für die Position x lassen sich $\langle x\rangle$ und $\langle x^2\rangle$ berechnen.
Wegen der Struktur von $P_{CL}(x,p)$ lässt sich der Erwartungswert einer beliebigen Funktion $F(x,p)$ und insbesondere von $\langle p\rangle$ und $\langle p^2\rangle$ direkt aus $P_{CL}(x)$ ohne explizite Kenntnis von $P_{CL}(p)$ berechnen:

$$\begin{aligned}
\langle F(x,p)\rangle_{CL} &= \int dx \int dp P_{CL}(x,p) F(x,p) && (17)\\
&= \frac{1}{2}\int dx P_{CL}(x)\left[F\left(x, -\sqrt{2m[E - V(x)]}\right) + F\left(x, \sqrt{2m[E - V(x)]}\right)\right] && (18)
\end{aligned}$$

Das Grundwerkzeug um Unschärfen in der klass. Mechanik berechnen zu können, ist nun gelegt. Im nächsten Abschnitt werden konkrete Beispiele berechnet.

4 Beispiele

4.1 Harmonischer Oszillator

4.1.1 Berechnung der klassischen Unschärfe

Für den harmonischen Oszillator werden in den Ausdruck $P_{CL}(x) = \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{E-V(x)}}$ die bekannten Größen der Energie und des Potentials des harmonischen Oszillators $E = m\omega^2 A^2/2$ und $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ eingesetzt.

Man erhält

$$\rightarrow P_{CL}(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}} \tag{19}$$

Es werden die dimensionslosen und skalierten Variablen

$$X = \frac{x}{A},\ P = \frac{p}{\sqrt{2mE}} \tag{20}$$

eingeführt. Ziel ist es, dass Produkt $(\Delta X)^2_{CL}(\Delta P)^2_{CL}$ zur Bestimmung der Unschärfe zu berechnen.
A ist die Amplitude der Oszillatorschwingung. Das Teilchen darf sich in der klass. Mechanik nur im Bereich $-A \leq x \leq A$ aufhalten.
Daher wird zur Berechnung der Erwartungswerte von $-A$ bis A integriert.
Berechnung der Erwartungswerte:

$$\langle X\rangle_{CL} = \frac{1}{A}\int dx P_{CL}(x)x = \frac{1}{A\pi}\int_{-A}^{A} dx \frac{x}{\sqrt{A^2-x^2}} = 0 \tag{21}$$

$$\langle X^2\rangle_{CL} = \frac{1}{A^2}\int_{-A}^{A} dx P_{CL}(x)x^2 = \frac{1}{2} \tag{22}$$

$$\langle P\rangle_{CL} = \frac{1}{2m\omega A}\int_{-A}^{A} dx P_{CL}(x)\left(-\sqrt{2m\left[E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]} + \sqrt{2m\left[E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]}\right) = 0 \tag{23}$$

$$\langle P^2\rangle_{CL} = \frac{1}{m^2\omega^2A^2}\int_{-A}^{A} dx P_{CL}(x)2m\left[E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right] = \frac{1}{2} \tag{24}$$

Die Varianzen lassen sich nun mit folgender Vorschrift berechnen:

$$(\Delta X)^2_{CL} = \langle X^2\rangle_{CL} - \langle X\rangle^2_{CL} = \frac{1}{2}, \tag{25}$$

$$(\Delta P)^2_{CL} = \langle P^2\rangle_{CL} - \langle P\rangle^2_{CL} = \frac{1}{2} \tag{26}$$

Daraus resultiert

$$\rightarrow (\Delta X)^2_{CL}(\Delta P)^2_{CL} = \frac{1}{4} \tag{27}$$

Man erhält also für das klassische Ensemble im harmonischen Oszillatorpotential eine Unschärfe!
Diese Unschärfe wird nun mit der im quantenmechanischen System verglichen.

4.1.2 Berechnung der quantenmechanischen Unschärfe

Mit der bekannten Energie $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ für den quantenmechanischen Oszillator ergibt sich

$$A_n = \sqrt{\frac{2E_n}{m\omega^2}} = \sqrt{\frac{(2n+1)\hbar}{m\omega}} \tag{28}$$

und damit die neuen dimensionslosen und skalierten Variablen
$\hat{X} = \hat{x}\sqrt{\frac{m\omega}{(2n+1)\hbar}}$, $\hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{(2n+1)\hbar m\omega}}$

Es folgt die Berechnung der Erwartungswerte von $\hat{X}$,$\hat{X}^2$,$\hat{P}$ und $\hat{P}^2$ für stat. Zustände $\Psi_n(x)$:

$$\langle \hat{X} \rangle_{QM} = \sqrt{\frac{m\omega}{(2n+1)\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_n(x)|^2 x = 0 \tag{29}$$

$$\langle \hat{X}^2 \rangle_{QM} = \frac{m\omega}{(2n+1)\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_n(x)|^2 x^2 = \frac{1}{2} \tag{30}$$

$$\langle \hat{P} \rangle_{QM} = -i\sqrt{\frac{\hbar}{(2n+1)m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_n^*(x) \frac{d\Psi_n(x)}{dx} = 0 \tag{31}$$

$$\langle \hat{P}^2 \rangle_{QM} = \frac{-\hbar}{(2n+1)m\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_n^*(x) \frac{d^2\Psi_n(x)}{dx^2} = \frac{1}{2} \tag{32}$$

Damit erhält man nach analoger Berechnung zum klassischen Fall:

$$(\Delta\hat{X})^2_{QM}(\Delta\hat{P})^2_{QM} = \frac{1}{4} \tag{33}$$

Also erhält man für den Fall des stationären harmonischen Oszillators die gleichen Unschärfen in klassischer Mechanik und Quantenmechanik.

4.2 Eindimensionaler Potentialtopf

4.2.1 Berechnung der klassischen Unschärfe

Für einen symmetrischen, unendlichen Potentialtopf gilt

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } -L/2 \le x \le L/2, \\ \infty & \text{für } |x| > L/2. \end{cases} \tag{34}$$

mit der dazugehörigen Wahrscheinlichkeitsfunktion

$$P_{CL}(x) = \begin{cases} 1/L & \text{für } |x| \le L/2, \\ 0 & \text{für } |x| > L/2. \end{cases} \tag{35}$$

daraus ergeben sich die neuen Variablen

$$X = \frac{x}{L/2},\ P = \frac{p}{\sqrt{2mE}} \tag{36}$$

Berechnung der Erwartungswerte:

$$\langle X \rangle_{CL} = \int dx P_{CL}(x) \frac{x}{L/2} = \frac{2}{L^2} \int_{-L/2}^{L/2} x dx = 0 \tag{37}$$

$$\langle X^2 \rangle_{CL} = \int P_{CL}(x) \frac{x^2}{L^2/4} = \frac{4}{L^3} \int_{-L/2}^{L/2} dx x^2 = \frac{1}{3} \tag{38}$$

$$\langle P \rangle_{CL} = 0 \tag{39}$$

$$\langle P^2\rangle_{CL} = \int dx P_{CL}(x)\frac{2mE}{2mE} = \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} dx = 1 \tag{40}$$

Daraus resultiert die Unschärfe

$$(\Delta X)^2_{CL}(\Delta P)^2_{CL} = \frac{1}{3} \tag{41}$$

4.2.2 Berechnung der quantenmechanischen Unschärfe

Für die Berechnung in der Quantenmechanik brauchen wir die Lösungen gerader und ungerader Parität der stationären Schrödingergleichung. Diese sind wie folgt

$$\psi_n^{(+)} = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos(n\pi x/L) \;\; n = 1{,}3{,}5{,}..., \tag{42}$$

$$\psi_n^{(-)} = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(n\pi x/L) \;\; n = 2{,}4{,}6{,}..., \tag{43}$$

mit der entsprechenden Energie

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \tag{44}$$

erhalten wir die dimensionslosen Variablen

$$\hat{X} = \frac{\hat{x}}{L/2},\; \hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{2mE_n}} = \frac{\hat{p}}{n\pi\hbar/L} \tag{45}$$

Damit lassen sich die **Erwartungswerte** berechnen:

$$\langle\hat{X}\rangle_{QM} = \frac{1}{L/2}\int_{-L/2}^{L/2} dx|\psi_n^{(\pm)}(x)|^2 x = 0 \tag{46}$$

$$\langle\hat{X}^2\rangle_{QM} = \frac{1}{L^2/4}\int_{-L/2}^{L/2} dx|\psi_n^{(\pm)}(x)|^2 x^2 = \frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2} \tag{47}$$

$$\langle\hat{P}\rangle_{QM} = -i\frac{L}{n\pi}\int_{-L/2}^{L/2} dx\psi_n^{(\pm)}(x)\frac{d\psi_n^{(\pm)}(x)}{dx} = 0 \tag{48}$$

$$\langle\hat{P}^2\rangle_{QM} = -\frac{L^2}{n^2\pi^2}\int_{-L/2}^{L/2} dx\psi_n^{(\pm)}(x)\frac{d^2\psi_n^{(\pm)}(x)}{dx^2} = 1 \tag{49}$$

Daraus resultiert die Unschärfe

$$(\Delta\hat{X})^2_{QM}(\Delta\hat{P})^2_{QM} = (\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2})\cdot 1 \tag{50}$$

Für $n \to \infty$:

$$\lim_{n\to\infty}(\Delta\hat{X})^2_{QM}(\Delta\hat{P})^2_{QM} = \frac{1}{3} \tag{51}$$

Dies liefert das gleiche Ergebnis wie im klassischen Fall!
Das heißt, man findet in diesem quantenmechanischen System für $n \to \infty$ die gleiche Unschärfe wie in dem betrachteten klassischen Fall.

5 Zusammenfassung

Es gibt also gewisse Berührpunkte zwischen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik.
Einer dieser liegt also in der Unschärfe verschiedener Systeme.
Es ist also möglich, bei der Betrachtung eines klassischen Teilchenensembles gleicher Energie aber verschiedener Anfangszustände eine Ort-Impuls-Unschärfe zu finden, die der in der Quantenmechanik gleicht, bzw. ebenfalls durch die Quantenmechanik erreicht werden kann.

In dieser Arbeit wurde nur ein quadratisches und ein lineares Potential für stationäre Systeme untersucht. Für eine nähere Betrachtung dieses Grenzfalles wäre eine Untersuchung weiterer Potentiale interessant.

6 Quellen

- "The uncertainty product of position and momentum in classical dynamics",A.R. Usha Devi, H.S. Karthik, Am. J. Phys., Vol. 80, p. 708, 2012
- "Quantum and classical probability distributions for position and momentum", R.W. Robinett, Am. J. Phys., Vol. 63, p. 823, 1995
- "Quantentheorie", Gernot Münster, de Gruyter, 2010