

Quantenmechanik des irregulären Streuens

Von R. Blümel und U. Smilansky*)

Praktisch all unser Wissen über den Mikrokosmos stammt letztlich aus Streuexperimenten. Daher ist die Theorie der Streuung zweifellos eines der wichtigsten Teilgebiete der Physik – ein im wesentlichen abgeschlossenes Teilgebiet, wie noch bis vor kurzem viele Experten glaubten, als sich auch in der Streutheorie eine kleine Revolution ereignete! Es wurde nämlich entdeckt, daß selbst einfache Streusysteme dynamische Instabilitäten aufweisen können [1] und damit die notwendigen Voraussetzungen für das Auftreten von deterministischem Chaos (vgl. [2]) besitzen. Die Untersuchung komplexer Streuphänomene in dynamisch instabilen Streusystemen ist mit dem Sammelnamen „irreguläres Streuen“ belegt worden [1], und Aufgabe dieses Artikels soll es sein, zu untersuchen, wie sich klassisch irreguläres Streuen auf der Quantenebene manifestiert. Insbesondere soll, ähnlich wie in gebundenen Systemen [3], die Frage nach dem Auftreten von „Quantenchaos“ in Streusystemen gestellt werden. Wir illustrieren unsere Resultate anhand eines experimentell realisierbaren Streusystems, das erste seiner Art, das sowohl klassisch als auch quantenmechanisch behandelt wurde [1]. Es zeigt exemplarisch die *universellen* Eigenschaften chaotischer Streusysteme, die von der Kernphysik bis zur Optik, von mesoskopischen Systemen bis zur Wirbelstreuung in der Hydrodynamik [1], in praktisch allen Gebieten der modernen Physik auftreten und insbesondere sogar in der Theorie chemischer Reaktionen [5] von Bedeutung sind.

Betrachten wir das Streusystem in Abb. 1: Der bewegliche magnetische Dipol D besitzt einen Rotationsfreiheitsgrad (reibungsfreie Drehung um den Punkt A) und einen Translationsfreiheitsgrad (der Punkt A ist auf der x -Achse frei verschiebbar). Bei x_1 , x_2 und x_3 sind starr drei weitere Dipolmagnete, M_1 , M_2 und M_3 , angebracht, die auf der x -Achse ein magnetisches Feld erzeugen, das wir der Einfachheit halber durch drei Gauß-Funktionen approximieren wollen:

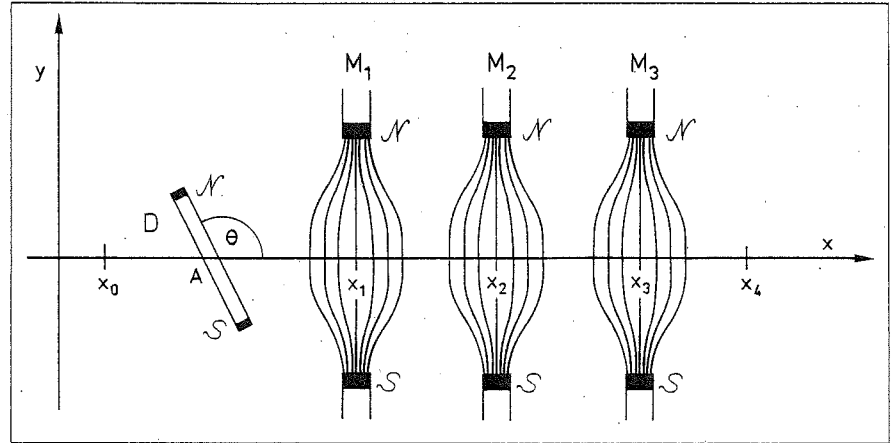


Abb. 1: Vorgeschlagener Versuchsaufbau zur chaotischen Streuung (Beschreibung siehe Text).

$$B(x) \approx B_0 \sum_{j=1}^3 \exp\left(-\left(\frac{x-x_j}{\sigma}\right)^2\right) \quad (1)$$

Nimmt man an, daß der Dipol D sehr klein gegen den Abstand der Pole der stationären Magnete ist, so daß das Magnetfeld über die gesamte Ausdehnung von D praktisch senkrecht auf der x -Achse steht, dann ist die magnetische Wechselwirkungsenergie des Dipols D mit dem Feld der drei Magneten durch

$$V(x, \theta) = \mu B(x) \sin(\theta) \quad (2)$$

gegeben, wobei wir mit μ das magnetische Dipolmoment von D bezeichnen und θ der Winkel ist, den der Dipol mit der x -Achse bildet. Die Hamiltonsche Funktion des Dipols, in anderen Worten: seine Gesamtenergie, kann damit als

$$H(x, p, \theta, I) = \frac{p^2}{2m} + \frac{I^2}{2R} + V_0 \sin(\theta) \sum_{j=1}^3 \exp\left(-\left(\frac{x-x_j}{\sigma}\right)^2\right) \quad (3)$$

geschrieben werden, worin p den linearen Impuls und I den Drehimpuls des Dipols D bezeichnet. Zur Abkürzung haben wir außerdem die Größe $V_0 = \mu B_0$ eingeführt, die maximale Wechselwirkungsenergie des beweglichen Dipols im magnetischen Feld der stationären Dipole. Die träge Masse des Dipols D wurde mit m bezeichnet und das Trägheitsmoment

mit R . Wir werden im folgenden in dimensionslosen Einheiten rechnen, wobei $m = \sigma = 1$ und $R = |x_3 - x_2| = |x_2 - x_1| = 10$ gesetzt wurde. Der gesamte in Abb. 1 skizzierte Versuchsaufbau läßt sich mit den Mitteln der Schulphysik realisieren, wenn man z. B. einen drehbaren magnetischen Dipol auf ein Luftkissenfahrzeug montiert.

Ein „Streuversuch“ ist folgendermaßen definiert: Der Dipol befindet sich zur Zeit $t = 0$ bei x_0 (in der feldfreien Region) und besitzt die Gesamtenergie E . Die Wahl des Anfangsdrehimpulses I_i ($|I_i| < \sqrt{2RE}$) legt dann den Einschußimpuls $p_i = \sqrt{2E - I_i^2/R}$ fest. Der Anfangszustand des Dipols ist aber durch Festlegung von p_i und I_i klassisch noch nicht eindeutig bestimmt. Man hat noch die Freiheit, den Anfangswinkel θ_i zu wählen. Der Dipol wird nun für verschiedene Werte von θ_i in das inhomogene Feld der drei Magneten eingeschossen, und der Streuversuch ist beendet, wenn D wieder in der feldfreien Region, also entweder bei x_0 (Reflexion) oder bei x_4 (Transmission), ankommt. Das Resultat eines Streuversuchs ist dann der momentane Wert der dynamischen Variablen p_f , I_f , θ_f bei x_0 bzw. bei x_4 .

Für vorgegebene Einschußenergie E und Anfangsdrehimpuls I_i lassen sich Enddrehimpuls I_f und Rotationswinkel θ_f als Funktion von θ_i bestimmen. Betrachtet man speziell die Abhängigkeit des Enddrehimpulses I_f vom Anfangswinkel θ_i , so ergibt sich für kleine Magnetfelder,

* Dr. Reinhold Blümel, MPI für Quantenoptik, 8046 Garching, z. Zt. Univ. of Pennsylvania, Dept. of Chemistry, Philadelphia PA, 19104. Prof. Dr. Uzy Smilansky, The Weizmann Institute, 76100 Rehovot, Israel.

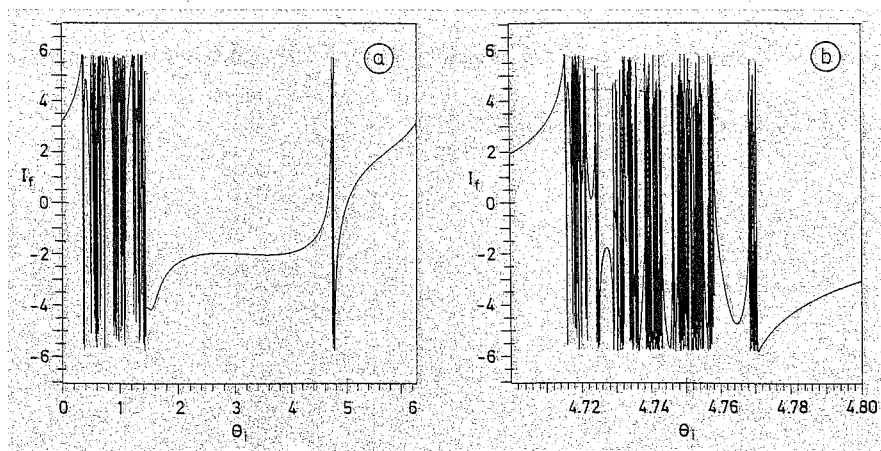


Abb. 2: a) Die Streufunktion I_f in Abhängigkeit vom Winkel θ_i , den der Dipol zu Beginn mit der x-Achse bildet für $E = 1.7, V_0 = 3$ und $I_i = 2$ (vgl. Abb. 1). b) Ein vergrößerter Ausschnitt von a).

d. h. $V_0 \ll E$, der Enddrehimpuls $I_f(\theta_i)$ als eine glatte, differenzierbare Funktion ohne wesentliche Besonderheiten. Eine Überraschung erlebt man, falls V_0 von der Größenordnung der Einschubenergie wird. Abb. 2a zeigt die Funktion $I_f(\theta_i)$ für $V_0 = 3$ und $E = 1.7$ im gesamten Intervall $0 < \theta_i < 2\pi$. Man erkennt glatte und „schroffe“ Bereiche der Funktion. Abb. 2b zeigt einen vergrößerten Ausschnitt des schroffen Gebiets um $\theta_i = 4.75$. Wieder erkennt man ein Wechselspiel von strukturierten und strukturlosen Gebieten, und dieses Verhalten setzt sich bei weiterer Vergrößerung endlos fort! Die Singularitäten von I_f entsprechen Anfangswinkeln θ_i , die zu Dipoltrajektorien führen, die „unentschieden“ unter ständiger Umwandlung von Rotations- in Translationsenergie (und umgekehrt) ziellos zwischen den drei Magneten hin- und herwandern. Dies führt zu unendlich langen Verweildauern von D in der Wechselwirkungszone der drei stationären Magnete. Die Gesamtheit dieser Singularitäten

von I_f bildet eine Menge von fraktaler Dimension, eine „Cantor-Menge“, die über abzählbar viele Elemente enthält, jedoch vom Maß Null ist. Die Untersuchung des Modells aus Abb. 1 zeigt, daß komplizierte Streuphänomene nicht notwendigerweise auf strukturell komplizierten Streuern beruhen (wie z. B. im Falle von Vielteilchen-Streusystemen mit entsprechend vielen Freiheitsgraden), sondern in den einfachsten Streusystemen – hier in einem System mit nur zwei Freiheitsgraden – auftreten können. In diesem Zusammenhang soll nicht unerwähnt bleiben, daß qualitativ dieselben Phänomene auch in einem Modell mit nur einem stationären Dipolmagneten beobachtet werden können. Die Verwendung von mehr als einem stationären Dipol vergrößert jedoch erheblich die θ_i -Bereiche, in denen irreguläres Streuen auftritt.

Überraschenderweise (die Menge der Streusingularitäten ist vom Maß Null!) hat das Einsetzen der klassisch irregulären Streuung ganz handfeste Folgen für

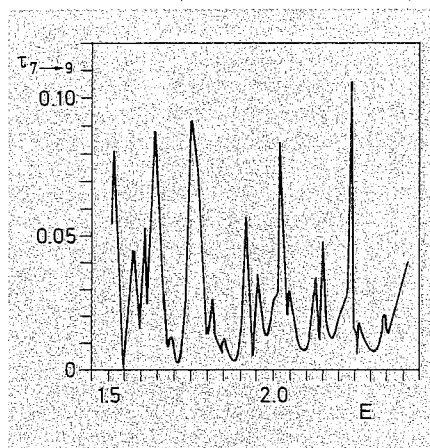


Abb. 3: Quantenmechanischer Versuch: Transmissionswahrscheinlichkeit $\tau_{7,9}$ als Funktion der Einschubenergie E im klassisch-chaotischen Regime.

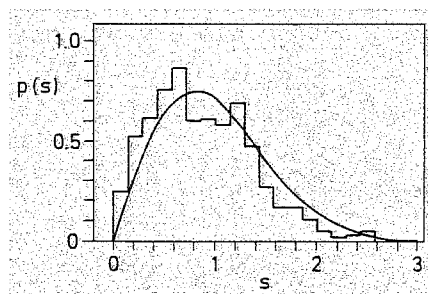


Abb. 4: Die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(s)$, einen (normierten) Abstand s zwischen benachbarten S -Matrix-Eigenwinkeln zu finden. Das Histogramm zeigt $p(s)$, wie es aus der numerischen Lösung der quantenmechanischen Version des Modells von Abb. 1 im klassisch-chaotischen Parameterbereich erhalten wurde. Die durchgezogene Linie ist die theoretisch erwartete Wahrscheinlichkeitsverteilung für unitäre, symmetrische Zufallsmatrizen.

die quantenmechanischen Observablen der quantisierten Version des in Abb. 1 beschriebenen Modells. Um das klassische Modell „auf die Quantenebene zu heben“, stellen wir uns einfach statt des magnetischen Dipols D ein polares Molekül (z. B. CsI) und statt der stationären Magnete elektrisch geladene Drähte vor („N“ → „-“; „S“ → „+“). Wenn wir dann in (3) die klassischen Impulse p und I durch ihre entsprechenden Quantenoperatoren ersetzen, also

$$p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

und

$$I \rightarrow \hat{I} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}$$

dann beschreibt (3) (mit den geeigneten Randbedingungen) näherungsweise die quantenmechanische Streuung polarer Moleküle, die in einem Drehimpulszustand $|n_i \approx I_i/\hbar \rangle$ präpariert sind. Sollen nun die oben beschriebenen Streuversuche mit entsprechenden quantenmechanischen Streuversuchen verglichen werden, so muß beachtet werden, daß bei vorgegebener Drehimpulsquantenzahl n_i der Rotationswinkel θ_i wegen der Heisenbergschen Unschärferelation nicht festgelegt werden kann. Wir untersuchen daher für festes n_i Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten als Funktion der Einschubenergie E und diskutieren die beobachteten Quantenphänomene im klassisch-regulären und im klassisch-irregulären Regime.

Die erste quantenmechanische Observable, die wir untersuchen wollen, ist die Transmissionswahrscheinlichkeit eines polaren Moleküls durch den oben beschriebenen „auf Quantenmechanik umgestellten“ Apparat aus Abb. 1. Beim Durchgang durch das inhomogene elektrische Feld der drei geladenen Drähte wird sich im allgemeinen die Drehimpulsquantenzahl des Moleküls von n_i nach n_f ändern. Wir bezeichnen also die Transmissionswahrscheinlichkeit bei gleichzeitiger Änderung der Drehimpulsquantenzahl von n_i nach n_f mit τ_{n_i, n_f} . Sie wurde in Ref. 4 für den Übergang $n_i = 7 \rightarrow n_f = 9$ numerisch berechnet. Für $V_0 \ll E$, also im klassisch-regulären Regime, ist $\tau_{7,9}(E)$ eine glatte, strukturlose Funktion der Energie. Für $V_0 \gg E$ jedoch, d. h. im klassisch-chaotischen Regime, fluktuiert $\tau_{7,9}(E)$ stark als Funktion der Energie (siehe Abb. 3). Die Form der Fluktuationen in der Transmissionswahrscheinlichkeit erinnert an ähnliche Fluktuationen, die in den Streuquerschnitten bestimmter Kerne gefunden und von Ericson ~~et al.~~ der 60er Jahre theoretisch vorhergesagt wurden [6]. „Ericson-Fluktuationen“ sind daraufhin die Kernphysik der

maßgeblich mitprägen, sind also vermutlich nichts anderes als die quantenmechanische Ausprägung von klassisch-irregulärem Streuen. Dachte man also bisher, die Erklärung für das Auftreten von Ericson-Fluktuationen in der Kompliziertheit eines Vielteilchen-Kernsystems suchen zu müssen, so liefert unser Modell die neue Einsicht, daß der wahre Grund für das Auftreten dieser Fluktuationen doch eher dynamischer Natur ist, und Ericson-Fluktuationen daher schon in den einfachsten Streusystemen beobachtet werden können.

Die vollständige Lösung eines quantenmechanischen Streuproblems ist gegeben, wenn die Streumatrix (S-Matrix) berechnet ist. Die Elemente der S-Matrix S_{n_i, n_f} bestimmen die quantenmechanischen Übergangsamplituden des Dipols D von n_i nach n_f . Die S-Matrix ist daher eine unitäre und in unserem Fall eine symmetrische Matrix. Sie wurde in Ref. [4] für das quantisierte Modell aus Abb. 1 numerisch berechnet. Im klassisch-regulären Bereich ($V_0 < E$) ergaben sich keine Besonderheiten. Im klassisch-chaotischen Bereich ($V_0 > E$) jedoch zeigten die Elemente der S-Matrix als Funktion der Ein-schußenergie starke, voneinander unabhängige, regellose Fluktuationen. Die Vermutung lag nahe, daß die S-Matrix im klassisch-chaotischen Bereich, obwohl mikroskopisch (durch Lösen der Schrödinger-Gleichung!) vollständig determiniert, von einer zufällig gewürfelten, unitär symmetrischen Matrix nicht zu unterscheiden ist. Die typischen Eigenschaften

solcher Zufallsmatrizen sind ebenfalls in den 60er Jahren, z. B. in Ref. [7], eingehend studiert worden. Unter anderem findet man hier auch folgenden Test: Bezeichnet man mit φ_k die Eigenphasen der S-Matrix, $S|k\rangle = e^{i\varphi_k}|k\rangle$, und mit $p(s)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte (auf den mittleren Abstand 1 normiert), Eigenphasenabstände $s = \varphi_{k+1} - \varphi_k$ zu finden, so sollte man für eine zufällig gezogene unitäre, symmetrische Matrix mit Wahrscheinlichkeit 1 die sogenannte „Wigner-Verteilung“ $p(s) = (\pi/2) \exp(-\pi s^2/4)$ erhalten [7]. Diese Verteilung ist in Abb. 4 als durchgezogene Linie dargestellt. Berechnet man die S-Matrix für das Modell in Abb. 1 im chaotischen Bereich ($V_0 > E$), so erhält man durch Auswertung der S-Matrix-Eigenphasenabstände das Histogramm in Abb. 4. Die Übereinstimmung mit der für Zufallsmatrizen geltenden Wigner-Verteilung ist frappierend und läßt den Schluß zu, daß sich die statistischen Eigenschaften der Streumatrix eines klassisch-chaotischen Streusystems mit Hilfe der Theorie der Zufallsmatrizen [7] beschreiben lassen – zumindest im Limes $\hbar \rightarrow 0$, wo die Dimension der Streumatrix wegen $\max n_i = \max n_f = \max I_d/\hbar = \sqrt{2RE}/\hbar$ sehr groß wird. Ähnliche Aussagen gelten für die statistischen Eigenschaften des quantenmechanischen Hamilton-Operators abgeschlossener Quantensysteme [3]. Insofern man also unter „Quantenchaos“ die Erforschung quantenmechanischer Effekte in klassisch-chaotischen Systemen versteht,

scheint die Theorie der Zufallsmatrizen das natürliche Werkzeug der Quantenchaos-Forschung zu sein. Es ist sogar möglich, daß die Quantentheorie des irregulären Streuens die a-posteriori-Rechtfertigung für die Anwendung der Theorie der Zufallsmatrizen auf komplizierte (Kern-) Reaktionen [8] liefert.

*

Herzlichen Dank der Deutsch-Israelischen Stiftung (GIF) für die großzügige Förderung unseres Projekts „Quantenmechanik des irregulären Streuens“.

- [1] B. Eckhardt u. C. Jung, J. Phys. A19 (1986) L829; B. Eckhardt, Europhys. Lett. 5 (1988) 107.
- [2] H. G. Schuster, Deterministic Chaos, Physik-Verlag, Weinheim, 1984.
- [3] G. Wunner, Phys. Blätter 45 (1989) Nr. 5, S. 139.
- [4] R. Blümel u. U. Smilansky, Phys. Rev. Lett. 60 (1988) 477.
- [5] D. W. Noid, S. K. Gray und S. A. Rice, J. Chem. Phys. 84 (1986) 2649.
- [6] T. Ericson, Phys. Rev. Lett. 5 (1960) 430; T. Ericson u. Th. Mayer-Kuckuk, Ann. Rev. Nucl. Sci. 16 (1966) 183.
- [7] M. L. Mehta: Random Matrices and the Statistical Theory of Energy Levels, Academic Press, New York, London 1967.
- [8] D. Agassi, H. A. Weidenmüller u. G. Mantzouranis, Phys. Rep. C22 (1975) 145.