

Grundsätze der Quantentheorie - soweit bereits gelernt

Die klassische Sichtweise

Basics

Man ist geneigt zu glauben, daß die "klassische" Behandlung von Teilchen so viel einfacher ist als die quantenmechanische- nicht nur begrifflich, sondern auch mathematisch. Schauen mer' mal.

- Klassisch beschreiben wir das Verhalten eines Teilchens mit der Masse m einfach durch das Newtonsche Grundgesetz. Dazu brauchen wir die Kraft $\underline{F}$, sowie Beschleunigung $\underline{a}$ und Geschwindigkeit $\underline{v}$.

$$\underline{F} = m \cdot \underline{a} = m \cdot \frac{d\underline{v}}{dt}$$

- Eine einfache Gleichung - im Vergleich zur Schrödingergleichung! Aber das täuscht. Denn die Kraft ist - bis auf Reibungskräfte, die es aber eigentlich gar nicht gibt - immer als Ableitung einer potentiellen Energie, eines "Potentials" U nach einer Koordinate definiert; z.B. $F_x = - \partial U / \partial x$.

In voller Schönheit schreibt sich das Newtonsche Grundgesetz also so:

$$- \left(\frac{\partial U(x, y, z, t)}{\partial x} + \frac{\partial U(x, y, z, t)}{\partial y} + \frac{\partial U(x, y, z, t)}{\partial z} \right) = m \cdot \left(\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 z}{\partial t^2} \right) = m \cdot \frac{\partial^2 \underline{r}}{\partial t^2}$$

- Das sieht jetzt nicht mehr so einfach aus! Und das *nur* in der klassischen Physik auftretende Phänomen der Reibung ist noch nicht mal enthalten!

Wie bei der Schrödingergleichung haben wir eine partielle Differentialgleichung 2. Ordnung.

- Der "Input" ist das für das zu lösende Problem vorliegende Potential $U(x, y, z, t)$ zusammen mit Anfangs- und Randbedingungen.
- Der "Output", d.h. die Lösung, gibt uns den Ortsvektor $\underline{r}$ des Teilchens als Funktion des Potentials sowie der Anfangs- und Randbedingungen.
- Gut dabei ist nur: Wir haben überhaupt kein Problem, uns zu einer Lösung etwas vorzustellen, oder etwas zu messen.

Aus der Lösung lassen sich abgeleitete Größen bilden; ganz einfach Geschwindigkeit $\underline{v}$ und Beschleunigung $\underline{a}$ als zeitliche Ableitungen von $\underline{r}$; wichtiger sind aber Impuls $\underline{p}$ und Gesamtenergie E , weil für diese Größen allgemeine Erhaltungssätze gelten: Wir haben:

$$\begin{aligned}\underline{v} &= \frac{\partial \underline{r}}{\partial t} \\ \underline{a} &= \frac{\partial^2 \underline{r}}{\partial t^2} \\ \underline{p} &= m \cdot \underline{v} \\ E &= \frac{1}{2} \cdot m \cdot \underline{v}^2 + U(\underline{r})\end{aligned}$$

- Falls das Potential zeitlich konstant ist, wird das auch die Gesamtenergie sein, und die Lösung der Grundgleichung wird erheblich einfacher.

Die quantenmechanische Sichtweise

Statt der Newtonschen Grundgleichung haben wir die [\(zeitabhängige\) Schrödingergleichung](#)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z, t)}{\partial z^2} + U(x, y, z, t) \cdot \psi \right) = i \cdot \hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}$$

- Rein mathematisch gesehen ist das auch nicht "schwerer" als die ausführliche Newtonsche Grundgleichung. Allerdings tauchen zwei neue Symbole auf: Die Wellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ anstelle des Ortsvektors $\underline{r}$, und eine Naturkonstante $\hbar = h/2\pi$; das "Plancksche Wirkungsquantum".

Der "Input" ist nach wie vor das Potential des Problems; falls es zeitunabhängig ist, vereinfacht sich die Schrödingergleichung sofort auf

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\Delta + U(x, y, z) \right) \psi(x, y, z) = E \cdot \psi(x, y, z)$$

Je nach Potential und Randbedingungen erhält man Lösungen für die Wellenfunktion $\psi(x, y, z)$ und automatisch immer auch für die Gesamtenergie E .

- Im Gegensatz zu simplen Fällen der Newtonschen Grundgleichung kann es aber für einen Satz an Randbedingungen *viele* Lösungen geben, die durch eine Satz von **Quantenzahlen** $h, i, k, l, \dots$ unterschieden werden. Die Lösungen schreiben sich dann so:

$$\psi_{h, i, k, l, \dots}(x, y, z) = \dots$$

$$E_{h, i, k, l, \dots} = \dots$$

- Die Lösungen ψ' der zeitabhängigen Schrödingergleichung lassen sich für *zeitlich konstante* Potentiale dann immer so darstellen:

$$\psi'_{h, i, k, l, \dots}(x, y, z, t) = \psi_{h, i, k, l, \dots}(x, y, z) \cdot \exp(-i \cdot \omega \cdot t)$$

$$E_{h, i, k, l, \dots} = \hbar \cdot \omega_{h, i, k, l, \dots}$$

So weit so gut. Wir stellen eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung auf, und lassen uns von den Mathematikern sagen, was für allgemeine Eigenschaften die Lösungen haben müssen. Für konkrete Fälle lösen wir die Gleichung (mehr oder weniger mühsam oder gleich numerisch) und erhalten einen Satz von Wellenfunktionen (sortiert durch Quantenzahlen).

- Aber was bedeutet das alles? Was hat man gewonnen, wenn man die Wellenfunktion eines Problems errechnet hat? Da sie im allgemeinen *komplex* sein wird, kann sie prinzipiell nicht einer der *menschlichen Erfahrung* zugänglichen physikalischen Größe entsprechen.

- Aber alle, der begrenzten menschlichen Erfahrung zugänglichen, oder besser gesagt, alle *messbaren* Größen, sind in der Wellenfunktion mehr oder weniger "getarnt" enthalten.

Das ist der Punkt wo Quantenmechanik anfängt etwas schwierig zu werden. Aber das ist (teilweise) das, was wir im Hauptstrang lernen wollen.