8.3 Die Schrödinger-Gleichung

- die grundlegende Gleichung der Quantenmechanik
- (in den bis jetzt diskutierten Fällen) eine Wellengleichung für Materiewellen (gilt aber auch allgemeiner)
- sie wird postuliert und lässt sich nicht herleiten
  (wie andere grundlegende Gesetzmässigkeiten: Hauptsätze der Thermodynamik, Newtonsche Bewegungsgleichung, …)

- Erinnerung: Verwendung von Wellengleichungen in der Mechanik, Elektrodynamik etc.

- Hier: Bestimme die fundamentale Differentialgleichung für welche die Wellenfunktion die quantenmechanischen Teilcheneigenschaften korrekt beschreibt.

- betrachte die Wellenfunktion eines **freien Teilchens** (in einer Dimension) gegeben durch eine ebene Welle entlang der x-Richtung mit Ausbreitungsgeschwindigkeit $v = \lambda\, \nu$

$$\Psi = A\, e^{-i\omega\left(t - \frac{x}{v}\right)} = A\, e^{-2\pi i\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)}$$

- ν und λ ausgedrückt in Energie E und Impuls p

$$E = h\nu \quad ; \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

- somit

$$\Psi = A\, e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

mit der reduzierten Planck-Konstanten $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

8.3.1 Intuitive Herleitung der **Schrödinger-Gleichung:**

- finde Wellengleichung für ψ durch Differentiation der Wellenfunktion für ein freies Teilchen ψ nach dem Ort *x* ...

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \iff p^2\psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi$$

… und nach der Zeit *t*

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\psi \iff E\psi = i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t}$$

- für ein nicht-relativistisches Teilchen (*v* < *c)* ist die Gesamtenergie gegeben durch

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x,t)$$

- Multiplikation mit ψ

$$E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi + U(x,t)\psi$$

- Ersetzen der Ausdrücke für **E** und **p**

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

kinetische Energie — potentielle Energie

dies ist die zeitabhängige **Schrödinger-Gleichung** in einer Dimension (1D)

- für U = 0 beschreibt sie ein freies Teilchen

- in drei Dimensionen (3D):

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

Laplace-Operator

Bemerkungen:

- das Potential *U* beschreibt alle externen Kräfte auf das Teilchen
- durch Lösung der Schrödinger-Gleichung kann die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Teilchens aus der Wellenfunktion ψ für jeden Ort *x* und jede Zeit *t* bestimmt werden.

Nocheinmal:

- Die Schrödinger-Gleichung ist ein Postulat.
- Quantenmechanische physikalische Effekte, die in Experimenten beobachtet werden, sind exzellent durch diese Gleichung beschrieben.
- Es gibt keine formale Herleitung für diese Gleichung

8.3.2 Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

- in vielen Problemen der Quantenmechanik hängt das Potential *U* nicht explizit von der Zeit *t* ab
- in diesen Fällen lässt sich die Schrödinger-Gleichung vereinfachen

- für die Wellenfunktion eines freien Teilchens gilt zum Beispiel:

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\, e^{\frac{i}{\hbar}px} = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\,\tilde{\psi}(x)$$

- es stellt sich heraus, dass die Wellenfunktion für alle zeitunabhängigen Probleme auf diese Art und Weise separiert werden kann

- Die Schrödinger-Gleichung lautet dann

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

$$\Rightarrow \quad E\,\tilde{\psi}(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\tilde{\psi}(x)\right) + e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\,U(x)\,\tilde{\psi}(x)$$

$$\Rightarrow \quad \left(E - U(x)\right)\tilde{\psi}(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\tilde{\psi}(x) = 0$$

- in drei Dimensionen (3D)

$$(E-U)\,\hat{\psi} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\hat{\psi} = 0$$

- Eine solche zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung kann eine oder mehrere Lösungen ψ_i besitzen.

- Die zu den verschiedenen Lösungen ψ_i gehörenden Energien E_i erklären auf natürliche Art die Quantisierung der Energie, die in stabilen zeitunabhängigen Systemen experimentell beobachtet wird

8.3.3 Der Hamilton-Operator

Der Gesamtenergie-Operator E eines quantenmechanischen System kann mittels des Impuls p und des potentiellen Energie-Operatoren U ausgedrückt werden

$$\hat{E} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) = \hat{H}$$

Dieser Operator wird dann der **Hamilton-Operator** *H* des Systems genannt.

zeitabhängige und ... $\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi$

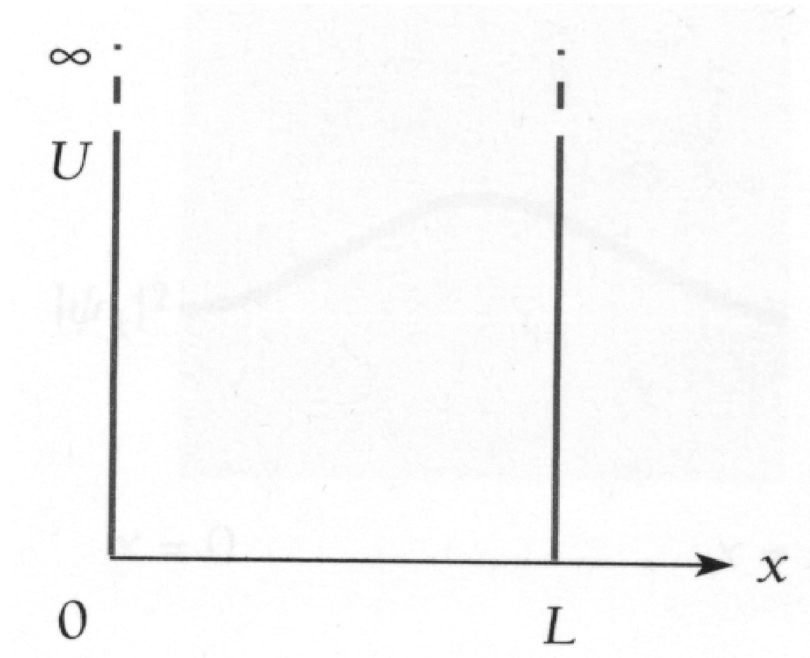
… zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung $\quad \hat{H}\psi = E\psi$

8.4 Teilchen in einem Potentialtopf gelöst mit der Schrödinger-Gleichung

ein einfaches Beispiel zur Anwendung der Schrödinger-Gleichung

- betrachte ein einzelnes Teilchen (z.B. ein Elektron) in einem 1D Potentialtopf (3D in den Übungen),

Eigenschaften des Potentials *U*:



- die Bewegung des Teilchens entlang der *x*-Richtung ist durch harte Wände in den Positionen $x = 0$ und $x = L$ eingeschränkt
- diese Tatsache wird durch eine Potential *U* mit $U = 0$ *für* $0 < x < L$ und $U = \infty$ an allen übrigen Orten beschrieben

Bestimme die Wellenfunktion ψ des Teilchens im Potentialtopf durch Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

- gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung für ψ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = E\psi \qquad \text{for } 0 < x < L$$

- allgemeine Lösung:

$$\psi = A \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x + B \cos \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x$$

- Randbedingungen $\psi = 0$ für $x < 0$ und $x > L$:

$$\psi(0) = 0 \qquad \Rightarrow \quad B = 0$$

$$\psi(L) = 0 \qquad \Rightarrow \quad \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L = n\pi$$

- erlaubte Energien E_n eines Teilchens mit der Quantenzahl n in einem Potentialtopf

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8 m L^2} \quad \text{for } n = 1, 2, 3 \ldots$$

- die unnormierte Wellenfunktion ψ_n zur Quantenzahl n

$$\psi_n = A \sin \frac{n\pi x}{L}$$

- Normierungsbedingung

$$\int_0^L |\psi_n|^2 dx = \int_0^L A^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 1$$

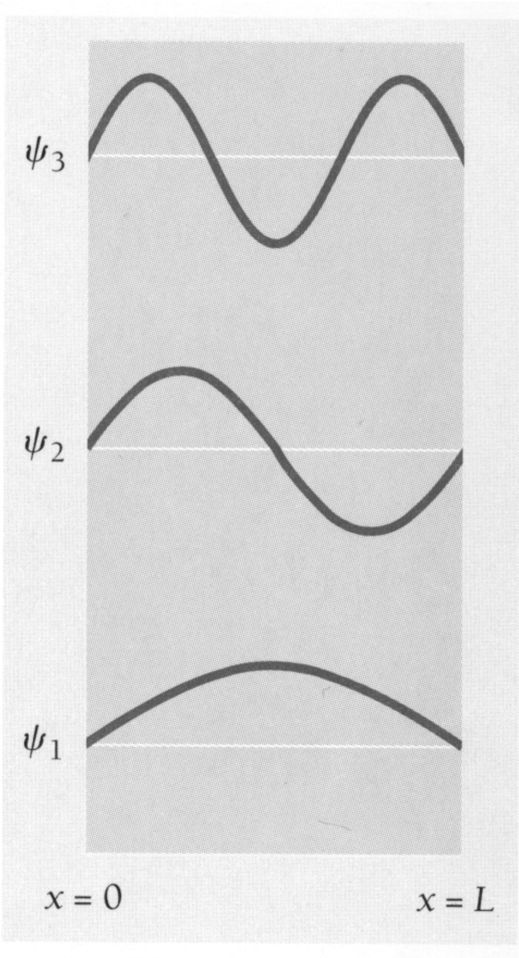
$$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

- normierte Wellenfunktion ψ

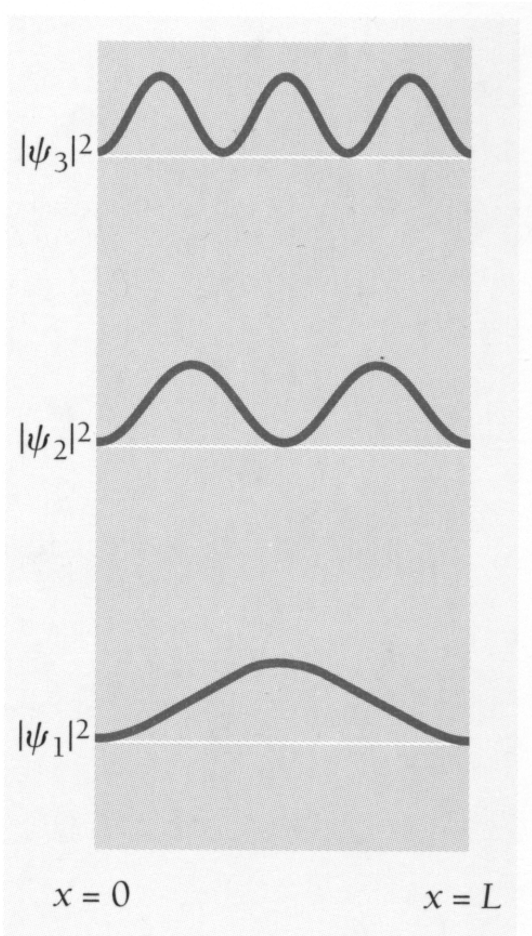
$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \; ; \; n = 1, 2, 3, \ldots$$

Abbildung der Wellenfunktion für verschiedenen Hauptquantenzahlen *n*:

- Wellenfunktionen ψ_n



- zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichten $|\psi_n|^2$



Bemerkungen:

- Wahrscheinlichkeitsdichten hängen stark von *n* ab
- $n = 1$: höchste Wahrscheinlichkeitsdichte im Zentrum ($x = L/2$)
- $n = 2$: niedrigste Wahrscheinlichkeitsdichte im Zentrum
- klassisch Wahrscheinlichkeitsdichte ist konstant

8.5 Erwartungswerte

- alle Informationen über ein Teilchen sind in seiner Wellenfunktion ψ enthalten
- wir wissen bereits wie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens an einem Ort mit einer gewissen Koordinate bestimmt wird
- um andere experimentell erfassbaren Grössen zu bestimmen werden **Erwartungswerte** berechnet

Beispiel aus der klassischen Physik:

- Schwerpunkt einer Ansammlung von N Teilchen mit jeweils N_i Teilchen bei der Koordinate x_i

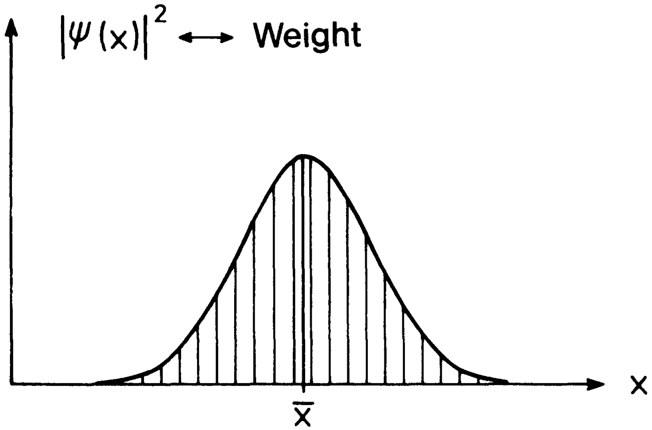
$$\bar{x} = \frac{N_1 x_1 + N_2 x_2 + \dots + N_m x_m}{N_1 + N_2 + \dots + N_m} = \frac{\sum x_i N_i}{\sum N_i}$$

Quantenmechanischer Erwartungswert des Ortes:

- für ein einzelnes Teilchen, das sich mit der Wahrscheinlichkeit p_i an der Position x_i befindet

$$\bar{x} = \frac{p_1 x_1 + \dots + p_m x_m}{p_1 + \dots + p_m} = \frac{\sum p_i x_i}{\sum p_i}$$

$$\text{mit} \quad p_i = |\psi_i|^2 dx_i$$



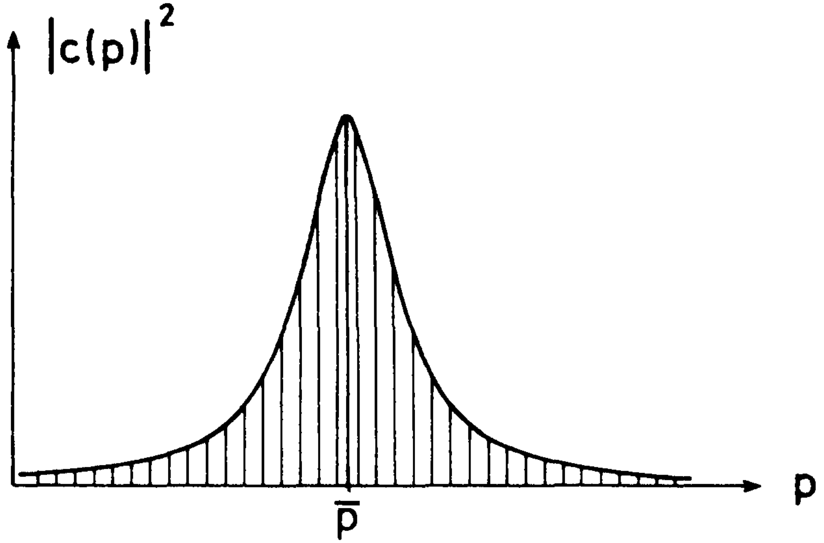
- im kontinuierlichen Grenzfall

$$\bar{x} = \frac{\int x |\psi|^2 dx}{\int |\psi|^2 dx} \hat{=} \langle x \rangle$$

Allgemeiner: Erwartungswert einer Grösse $G(x)$ (die kein Operator ist)

$$\langle G(x) \rangle = \int G(x) |\psi|^2 dx$$

Erwartungswert des Impulses



- betrachte Wellenpaket

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p)\, \frac{1}{\sqrt{h}}\, e^{\frac{ix}{\hbar}p}\, dp$$

und die Zerlegung der Wellenfunktion ψ nach ebenen Wellen

- $|c(p)|^2\, dp$ entspricht der Wahrscheinlichkeit ein Teilchen mit Impuls p im Intervall $p + dp$ zu finden

- Mittelwert des Impuls p

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} p\, |c(p)|^2\, dp$$

Problem: zur Berechnung des Mittelwertes des Impulses muss die Zerlegung der Wellenfunktion $\psi(x)$ nach ebenen Wellen mit Impuls p bekannt sein.

- Einfacherer Lösungsansatz für eine beliebige Wellenfunktion $\psi(x)$

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, \hat{p}\, \psi(x)\, dx = \int \psi^* \underbrace{\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)}_{\text{Impulsoperator}} \psi\, dx$$

8.6 Operatoren für den Impuls *p* und die Energie *E* und ihre Erwartungswerte

- Ableitung der Wellenfunktion ψ eines freien Teilchen nach dem Ort *x* und der Zeit *t*

$$\psi(x,t) = A\, e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p \psi \quad \Rightarrow \quad p\psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi \quad \Rightarrow \quad E\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

Quantenmechanische Operatoren:

Impuls/Orts-Operator: $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$; $\hat{x} = x$

Energie-Operator: $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Gesamtenergie-Operator:

$$\hat{E} = \hat{E}_{kin} + \hat{U} \qquad \text{mit } \hat{E}_{kin} = \frac{\hat{p}^2}{2m} ; \; \hat{U}(x) = U(x)$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U} = \hat{H}$$

Schrödinger-Gleichung folgt aus dem Hamilton-Operator und dem Gesamtenergie-Operator durch Multiplikation mit der Wellenfunktion ψ

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U \psi$$