

Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung beschreibt die zeitliche Entwicklung des Zustands eines quantenmechanischen-Systems. Die Schrödingergleichung besagt, dass die zeitliche Veränderung des Zustands von der Energie Bestimmt ist. Der Zustand ist eine Funktion aus dem Hilbertraum. Und die Energie wird durch einen Quantenmechanischen Operator den Hamiltonoperator repräsentiert.

Folgende Forderungen muss die Bewegungsgleichung erfüllen:

1. DGL 1. Ordnung in der Zeit, damit $\psi(\vec{r}, t)$ durch die Anfangsverteilung $\psi(\vec{r}, t = 0)$ bestimmt ist.
2. Sie muss linear in ψ sein, damit Superpositionsprinzip gilt (d.h. Linearkombination von Lösungen stellen wieder Lösungen dar \rightarrow deshalb treten Interferenzeffekte auf wie in der Optik. (Optik: Diese folgen aus der Linearität der Maxwellgleichungen)
3. Sie muss homogen sein, damit $\int_{-\infty}^{\infty} d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$ für alle Zeiten erfüllt bleibt.
4. Die ebenen Wellen $\psi(\vec{r}, t) = c \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t}$ sollen Lösungen der Gleichung sein.

Für die Aufstellung der Gleichung spielen zwei Beziehungen eine fundamentale Rolle. Die eine ist ein Zusammenhang zwischen Impuls p und Wellenlänge λ eines Quantenobjekts von **Louise de Broglie**

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \quad (1)$$

Und die andere ist eine Verknüpfung der Energie E mit der Frequenz ν von **Max Planck**

$$E = h\nu = h \frac{\omega}{2\pi} = \hbar \omega \quad (2)$$

Ableitung der Ebenen Wellen nach der Zeit ergibt

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -i\omega \psi(\vec{r}, t) \quad \text{mit } \omega = \frac{E}{\hbar} \quad (3)$$

$$= -i \frac{E}{\hbar} \psi(\vec{r}, t) \quad (4)$$

$$(5)$$

Unter Annahme für ein freies Teilchen gilt setzen wir die Energie unter Berücksichtigung der de Broglie Impulsbeziehung (1)

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (6)$$

lautet die Gleichung (3) nun

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{i\hbar k^2}{2m} \psi(\vec{r}, t) \quad (7)$$

$$= -\frac{\hbar}{i2m} \underbrace{i^2 k^2}_{\nabla^2} \psi(\vec{r}, t) \quad | \cdot i\hbar \quad (8)$$

$$\Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) \quad (9)$$

alternative Herleitung mit \vec{p} Die ebenen Wellen $\psi(\vec{r}, t) = c \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r} - i\omega t}$ sollen Lösungen der Gleichung sein.

Wobei die Energie für Photonen $E = hf = \frac{h}{2\pi} \omega = \hbar \omega$ und somit nach ω umgeformt und kinetische Energie eingesetzt $\omega = \frac{p^2}{2m\hbar}$

$$\psi(\vec{r}, t) = c \cdot e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - \frac{p^2}{2m} t)} \quad (10)$$

Für diese ebenen Wellen gilt:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{p^2}{2m} \psi(\vec{r}, t) \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{p^2}{2m} \psi(\vec{r}, t) \cdot \frac{\hbar^2}{\hbar^2} \\
 &= \frac{i\hbar}{2m} \cdot \underbrace{\frac{(ip)^2}{\hbar^2}}_{\nabla^2 \psi(\vec{r}, t)} \psi(\vec{r}, t) \\
 &= \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t)
 \end{aligned}$$

Aus 1.-4. erhalten wir die zeitabhängige Schrödingergleichung für ein freies Teilchen:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t)} \quad (11)$$

Annahme: Teilchen der Masse m unterliegt einem Potential $V(\vec{r}, t)$

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \\
 &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t)
 \end{aligned}$$