

# Schrödinger-Gleichung

## Fundamentalgleichung der Quantenmechanik

- Bestimmt Zeitentwicklung des Zustands
- Rolle von  $\hat{H}$ : erzeugt Dynamik, analog zu  $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$

Zeitabhängige Wellenfunktion | Hamilton-Operator

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{x}, t)$$

(39)

Imaginäre Einheit | Reduziertes Planck'sches Wirkungsquantum

## Erste Ordnung in der Zeit

Anfangszustand  $\Psi(\mathbf{x}, 0)$  bestimmt  $\Psi(\mathbf{x}, t)$   
für alle  $t$

## Klassisch

Zweite Ordnung: Ort *und* Geschwindigkeit  
nötig

## Komplex

- $i$  erzwingt komplexwertige Wellenfunktion
- Reelle Gleichung hätte keine Wellenausbreitung

## Ziel

Vereinfachung durch Trennung von Orts- und Zeitabhängigkeit

## Ansatz

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \underbrace{\psi(\mathbf{x})}_{\text{Ortswellenfunktion}} \cdot \underbrace{\phi(t)}_{\text{Zeitfunktion}} \quad (40)$$

Einsetzen in die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \psi(\mathbf{x}) \frac{d\phi(t)}{dt} = \phi(t) \hat{H} \psi(\mathbf{x}) \quad (41)$$

Division durch  $\psi(\mathbf{x}) \cdot \phi(t)$

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi}{dt} = \frac{1}{\psi(\mathbf{x})} \hat{H} \psi(\mathbf{x}) \quad (42)$$

- Linke Seite hängt nur von  $t$  ab
- Rechte Seite hängt nur von  $\mathbf{x}$  ab
- Gleichheit nur möglich, wenn beide Seiten gleich einer Konstanten  $E$  sind

$$i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dt} = E \quad \hat{H} \psi = E \psi \quad (43)$$

Lösung der Zeitgleichung

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (44)$$

### Stationäre Zustände

Aufenthaltswahrscheinlichkeit zeitunabhängig

$$|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 = |\psi(\mathbf{x})|^2 \cdot \underbrace{|e^{-iEt/\hbar}|^2}_{=1} = |\psi(\mathbf{x})|^2 \quad (45)$$

Eigenwertgleichung

Eigenfunktion

Energieeigenwert

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad (46)$$

Hamilton-Operator

- Operator auf Funktion gibt Vielfaches derselben Funktion
- Nur bestimmte Werte von  $E$  erfüllen die Gleichung

**Analogie**

- Drehung eines Vektors: nur Eigenvektoren behalten ihre Richtung
- Eigenwerte = erlaubte Messwerte

## Diskretes Spektrum

- Randbedingungen erzwingen Quantisierung
- Nicht jedes  $E$  ist erlaubt

$$E_1 < E_2 < E_3 < \dots \quad (47)$$

↑ Grundzustandsenergie

## Kontinuierliches Spektrum

Möglich für ungebundene Zustände (z.B. freies Teilchen)

## Physikalische Anforderungen an $\psi$

- Quadratintegrabel:  $\int |\psi|^2 d\mathbf{x} < \infty$
- Endlich:  $\psi$  darf nirgends divergieren

## Beispiel: Teilchen im Kasten

- Unendlich hohe Wände bei  $x = 0$  und  $x = L$
- $\psi(0) = \psi(L) = 0$
- Erzwingt stehende Wellen: nur ganzzahlige Halbwellenlängen passen

## $\psi$ muss stetig sein

Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi|^2$  kann nicht springen

## $\nabla\psi$ muss stetig sein

- Ableitung der Wellenfunktion knickfrei
- Ausnahme: unendlich hohe Potentialwände

## Konsequenz

- Nicht jede mathematische Lösung ist physikalisch
- Stetigkeitsbedingungen an Potentialstufen bestimmen Koeffizienten

Jedes Teilchen muss irgendwo sein

$$\int |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1 \quad (48)$$

- Lösung der Schrödinger-Gleichung ist bis auf Vorfaktor bestimmt
- Normierung fixiert diesen Vorfaktor

Konsequenz

$$\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} \psi(\mathbf{x}) = 0 \quad (49)$$

- Gebundene Zustände fallen im Unendlichen ab
- Nicht-normierbare Lösungen sind keine physikalischen Zustände

## Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$i\hbar \partial_t \Psi = \hat{H} \Psi$  bestimmt Zeitentwicklung des Zustands.

## Separationsansatz

$\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) e^{-iEt/\hbar}$  trennt Ort und Zeit; stationäre Zustände sind zeitlich konstant in  $|\Psi|^2$ .

## Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$\hat{H} \psi = E \psi$  als Eigenwertproblem; Randbedingungen erzwingen Quantisierung.

## Randbedingungen und Stetigkeit

$\psi$  endlich, stetig, mit stetigem  $\nabla\psi$ ; schränkt erlaubte Lösungen ein.

## Normierung

$\int |\psi|^2 d\mathbf{x} = 1$  sichert physikalische Interpretation als Wahrscheinlichkeit.