

1.2. Schrödinger - Gleichung

Die Wellenfunktion der Quantenmechanik ist eine komplexe Funktion: $\Psi(\vec{r}, t) \in \mathbb{C}$.

(Wir werden später verstehen, warum dies der Fall sein muß.)

Um eine Wellengleichung für $\Psi(\vec{r}, t)$ schreiben zu können, ist es nützlich sich daran zu erinnern, wie Fourier-Analyse mit solchen Funktionen funktioniert.

Fourier - Analyse

In einer Dimension: $f(x) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{f}(k) e^{ikx} \quad \left| \cdot e^{-iqx} \right| \int_{-\infty}^{\infty} dx$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-iqx} = \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{f}(k) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} e^{i(k-q)x}}_{\delta(k-q) \text{ "Dirac Deltafunktion"}}$$

$$\Rightarrow \tilde{f}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-iqx}$$

"Darstellung in Impulsraum" "Darstellung in Koordinatenraum"

In drei Dimensionen:

$$\begin{aligned} f(\vec{r}) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{f}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \\ \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{r} e^{i(\vec{k}-\vec{q}) \cdot \vec{r}} &= (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{q}) \\ &= (2\pi)^3 \delta(k_1-q_1) \delta(k_2-q_2) \delta(k_3-q_3) \\ \tilde{f}(\vec{k}) &= \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{r} f(\vec{r}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \end{aligned}$$

In Raum-Zeit:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{\Psi}(\vec{k}, \omega) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t} \quad \text{Konvention?}$$

In Prinzip ja, aber wir haben gesagt, daß ω und $\vec{k}$ nicht unabhängig sind, sondern durch Dispersionsrelation verbunden.

$$\Rightarrow \Psi(\vec{r}, t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \phi(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{k})t}$$

Die nichttriviale Struktur, "Physik", folgt also durch die Dispersionsrelation. Laut de Broglie ist die Dispersionsrelation der Energie-Impuls-Beziehung äquivalent. Versuchen wir jetzt diese Information als eine Gleichung für $\Psi(\vec{r}, t)$ zu repräsentieren.

Wir bemerken, daß für jede Fourier-Komponente $\equiv$ ebene Welle gilt:

$$\begin{aligned} E e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{k})t} &= \hbar \omega(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{k})t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{k})t} \\ \vec{p} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{k})t} &= \hbar \vec{k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{k})t} = -i\hbar \nabla e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{k})t} \end{aligned}$$

Die Dispersionsrelation sagt, daß

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad \text{bzw.} \quad \omega(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}$$

für jeden $\vec{p}$ bzw. $\vec{k}$.

Die Schreibweisen $E \hat{=} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ und $\vec{p} \hat{=} -i\hbar \nabla$ sind aber unabhängig von $\vec{p}$ bzw. $\vec{k}$, falls wir auf die Fourier-Darstellung der Wellenfunktion operieren. Damit liefern sie eine Beziehung, die nicht nur für die einzigen Fourier-Komponente, sondern die ganze Wellenfunktion, gilt:

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

"Die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen"

Verallgemeinerung

7

Die Energie eines Teilchens hängt im Allgemeinen nicht nur vom $\vec{p}$ sondern auch vom Ort $\vec{r}$ ab:

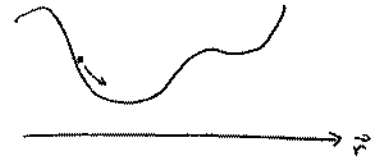
$$E = H(\vec{p}, \vec{r})$$

H heißt die Hamilton-Funktion in der klassischen Mechanik.

Ein gewöhnliches Beispiel:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

↑ "Potential".



Schrödinger hat verlangt, daß die Form dieser Gleichungen in der Quantenmechanik invariant bleibt indem wir

* auf die Wellenfunktion operieren
(bzw. ~ "eine Dispersionsrelation fixieren")

* E durch $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ und $\vec{p}$ durch $-i\hbar \nabla$ ersetzen.

Damit kriegen wir die Schrödinger-Gleichung:

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

Notabene:

* linear: Ψ_1, Ψ_2 Lösungen $\Rightarrow \Psi_1 + \Psi_2$ Lösung
 Ψ_1 Lösung $\Rightarrow N \cdot \Psi_1$ Lösung, $N \in \mathbb{C}$

* damit verlangt eine eindeutige Lösung auch die Bestimmung von Randbedingungen, und der Normierung; im nächsten Kapitel mehr darüber.

(8)

Frage: Ist die Ersetzung $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, $\vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$ wirklich unproblematisch?

Antwort: Nein!

Zum Beispiel, klassisch wären $H_1 \equiv r_k p_k$ und $H_2 \equiv p_k r_k$, $k, l \in \{1, 2, 3\}$ identisch. Aber jetzt:

$$(H_1 - H_2) \Psi(\vec{r}, t) \rightarrow \left[-r_k i\hbar \frac{\partial}{\partial r_k} + i\hbar \frac{\partial}{\partial r_k} r_k \right] \Psi(\vec{r}, t)$$

$$= -i\hbar r_k \cancel{\frac{\partial \Psi}{\partial r_k}} + i\hbar \cancel{\frac{\partial \Psi}{\partial r_k}} r_k + i\hbar S_{kk} \Psi$$

Kronecker Deltafunktion:

$$S_{kk} \equiv \begin{cases} 1, & k=l \\ 0, & k \neq l \end{cases}$$

$\neq 0!$

Wir schreiben: $r_k p_k - p_k r_k \equiv [r_k, p_k] \equiv$ "Kommutator" bzw. "Vertauschung"

$$\Rightarrow [r_k, -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_k}] = i\hbar S_{kk}$$

Solche Vertauschungsrelationen spielen in der QM eine zentrale Rolle, wie wir später sehen werden.

Sind also letztendlich doch kein Problem, sondern ein wichtiger Bestandteil.