

1.2 Schrödinger - Gleichung [Fließbach 2-3; Griffiths 1.1]

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: $f(x) =: \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{f}(k) e^{ikx} \quad | \cdot e^{-iqx} \quad | \int_{-\infty}^{\infty} dx$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-iqx} = \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{f}(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} e^{i(k-q)x}$$

$\delta(k-q)$ "Diracsche Deltafunktion"

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

"Darstellung im Impulsraum"

"Darstellung im Koordinatenraum"

In drei Dimensionen:

$$f(\vec{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{f}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

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

$$\tilde{f}(\vec{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{r} f(\vec{r}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

In Raum - Zeit:

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

Konvention

Im Prinzip ja, aber wir hatten gesagt, dass ω und \vec{k} nicht unabhängig sind, sondern durch eine Dispersionsrelation miteinander verbunden.

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

Die nichttriviale Struktur, „Physik“, liegt also in der Dispersionsrelation. Laut de Broglie ist die Dispersionsrelation der Energie-Impuls-Beziehung äquivalent. Versuchen wir jetzt diese Information als eine Gleichung für $\Psi(\vec{r}, t)$ darzustellen.

Wir bemerken, dass für jede Fourier-Komponente (d.h. ebene Welle) gilt:

$$E e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega(\vec{k})t} = \hbar\omega(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega(\vec{k})t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega(\vec{k})t} ;$$

$$\vec{p} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega(\vec{k})t} = \hbar\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega(\vec{k})t} = -i\hbar \nabla e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega(\vec{k})t} .$$

Die Dispersionsrelation verlangt, 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} gilt.

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-Komponenten, sondern für die ganze Wellenfunktion, gilt:

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

„Die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen“

Verallgemeinerung

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

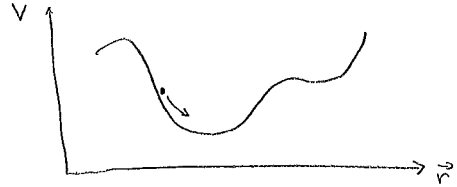
$$E = H(\vec{p}, \vec{r}).$$

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 erhalten 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: $\begin{cases} \Psi_1, \Psi_2 & \text{Lösungen} & \Rightarrow \Psi_1 + \Psi_2 & \text{Lösung} \\ \Psi_1 & \text{Lösung} & \Rightarrow N \cdot \Psi_1 & \text{Lösung, } N \in \mathbb{C} \end{cases}$

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

* Die Geschwindigkeit im Hamilton-Formalismus: $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$ (Mechanik II).
Vergleich mit Gruppengeschwindigkeit von Wellen: $v_G = \frac{d\omega}{dk}$ (Seite 4).

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

Antwort: Eigentlich scheint das gefährlich!

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

$$\begin{aligned}
 (H_1 - H_2) \Psi(\vec{r}, t) &\rightarrow \left[-x_k i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} x_k \right] \Psi(\vec{r}, t) \\
 &= -i\hbar x_k \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} + i\hbar \delta_{kl} \Psi + i\hbar x_k \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} \\
 &\neq 0!
 \end{aligned}$$

Kronecker-Delta:
 $\delta_{kl} \equiv \begin{cases} 1, & k=l \\ 0, & k \neq l \end{cases}$

Wir schreiben: $x_k p_k - p_k x_k =: [x_k, p_k]$ „Kommutator“ bzw. „Vertauschung“

$$\Rightarrow [x_k, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}] = i\hbar \delta_{kl}$$

Solche Vertauschungsrelationen spielen in der Quantenmechanik eine zentrale Rolle, wie wir später sehen werden; ihre Existenz ist also letztendlich doch kein Problem, sondern ein wichtiger Bestandteil der Theorie.

* Notation: $\begin{cases} \vec{r} := \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\ r := |\vec{r}| \end{cases}$