6.2 Schrödingergleichung

Mit den Relationen (6.29) können wir die Wellenfkt. $\Psi(x,t)$ für ein freies Teilchen angeben, $k = p/\hbar$, $\omega = E/\hbar$, $E = p^2/2m$

$$\boxed{\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \underset{\underset{\varphi(k)}{\shortparallel}}{\phi(p)} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}} \qquad (6.30)$$

Die Wellenfkt. in Gl. (6.30) hat die Dispersionrelation $E = p^2/2m$ und erfüllt damit die freie Schrödingergleichung

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t)} \qquad (6.31)$$

Gl. (6.31) folgt mit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, \phi(p)\, \underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{i/\hbar(px - Et)}}_{i\hbar (-i)/\hbar\, E\, e^{i/\hbar(px - Et)}}$$

$$= E \cdot \Psi(x,t) \qquad (6.32)$$

und der analogen Relation

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp\, \phi(p)\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{d^2}{dx^2}e^{i/\hbar(px-Et)}}_{\left(-\hbar^2/2m\right)\left(i/\hbar\right)^2 p^2 e^{i/\hbar(px-E}}$$

$$= p^2/2m\ \psi(x,t) \qquad (6.33)$$

und $E = p^2/2m$.

Die freie Schrödinger gl. in 1ner Dimension lässt sich leicht auf 3 Raumdim erweitern:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{x},t)} \qquad (6.34)$$

mit

$$\psi(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3p\ \phi(\vec{p})\,e^{-i/\hbar Et}\,e^{i/\hbar\vec{p}\vec{x}}$$

und

$$\phi(\vec{p})\,e^{-i/\hbar Et} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3x\ \psi(\vec{x},t)\,e^{-i/\hbar\vec{p}\vec{x}} \qquad (6.35)$$

In wechselwirkenden Systemen gilt die Relation $E = p^2/2m$ nicht mehr und wir haben im Allgemeinen

$$\boxed{\phi(\vec{p})\,e^{-i/\hbar Et} \to \phi(\vec{p},t)} \qquad (6.36)$$

Das ist der Fall, wenn wir 1 Teilchen in einem äußeren Potential V betrachten:

$$\boxed{\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x},t) &= \underbrace{\left[-\hbar^2/2m\, \Delta + V(\vec{x})\right]}_{H} \Psi(\vec{x},t) \\ &= H \cdot \Psi(\vec{x},t) \end{aligned}} \qquad (6.37)$$

mit Hamiltonoperator H. Wir hatten $\Psi(\vec{x},t)$ als Wahrscheinlichkeitsamplitude eingeführt. Für diese Bedeutung ist essentiell, daß die Gesamtwahrscheinlichkeit $=1$ erhalten ist,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x \, \underbrace{|\Psi(\vec{x},t)|^2}_{P(\vec{x},t)} = 0 \qquad (6.38)$$

mit

$$\int d^3x \, |\Psi(\vec{x},t)|^2 = 1$$

Wir zeigen dies für Ψ's, die Gl.(6.37) erfüllen.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(\vec{x},t)$ erfüllt die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\vec{x},t) = \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{x},t)\,\psi(\vec{x},t)$$

$$= \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\underbrace{\tfrac{i}{\hbar}\left(-\tfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi^*}_{(\ )^*,\ V\in\mathbb{R}} \qquad -\tfrac{i}{\hbar}\left(-\tfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi$$

$$= -i\frac{\hbar}{2m}\left[(\Delta\psi^*)\psi - \psi^*\Delta\psi\right] \qquad (6.39)$$

$$= \frac{\hbar}{2mi}(-\vec{\nabla})\left[\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right]$$

Wir definieren die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\vec{j}(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right] \qquad (6.40)$$

und erhalten die Kontinuitätsgleichung

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} P(\vec{x},t) + \vec{\nabla}\vec{j}(\vec{x},t) = 0} \qquad (6.41)$$

Es folgt die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit,

$$\boxed{\frac{d}{dt}\int d^3x\, P(\vec{x},t) = -\int d^3x\, \vec{\nabla}\vec{j} \underset{\uparrow}{=} 0} \qquad (6.42)$$

$\vec{j}(|\vec{x}|\to\infty) = 0$

Damit haben wir endgültig die Bedeutung von $\psi(\vec{x},t)$ als Wahrscheinlichkeitsamplitude etabliert.

Erwartungswerte sind damit als entsprechende Integrationen über $\int d^3x |\psi|^2$ definiert; z.B.

$$\langle \vec{x} \rangle = \int d^3x \, |\psi(\vec{x},t)|^2 \, \vec{x}$$

oder allgemein $\qquad (6.43)$

$$\langle f(\vec{x}) \rangle = \int d^3x \, |\psi(\vec{x},t)|^2 \, f(\vec{x})$$

Wir möchten allerdings auch Impulsmessungen durchführen, d.h.

$$\langle \vec{p} \rangle = \; ? \qquad (6.44)$$

Da wir die Wahrscheinlichkeitsverteilung auch im Impulsraum kennen, schreiben wir

$$\langle \vec{p} \rangle = \int d^3p \, |\phi(\vec{p},t)|^2 \, \vec{p} \qquad (6.45)$$

mit ϕ aus Gl. (6.35) & (6.36).

Es gilt

$$
\begin{aligned}
\langle \vec{p} \rangle &= \int d^3p \; \Phi^*(\vec{p},t) \boxed{\vec{p}} \overbrace{\int \frac{d^3x}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \, \psi(\vec{x},t)\, e^{-i/\hbar\, \vec{p}\vec{x}}}^{\Phi(\vec{p},t) \,=\, \text{Gl. } (6.35)} \\
&= \int d^3x \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \, \Phi^*(\vec{p},t) \; \psi(\vec{x},t) \boxed{i\hbar\vec{\nabla}} e^{-i/\hbar\, \vec{p}\vec{x}} \\
&= \int d^3x \underbrace{\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \, \Phi^*(\vec{p},t)\, e^{-i/\hbar\, \vec{p}\vec{x}}}_{\psi^*(\vec{x},t)} \boxed{(-i\hbar\vec{\nabla})} \psi(\vec{x},t) \\
&= \int d^3x \; \psi^*(\vec{x},t) \boxed{\hat{\vec{p}}} \; \psi(\vec{x},t)
\end{aligned}
\qquad (6.46)
$$

mit

$$
\boxed{\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}} \, , \qquad (6.47)
$$

dem Impulsoperator $\hat{\vec{p}}$. Es folgt sofort, daß

$$
\langle g(\vec{p}) \rangle = \int d^3x \; \psi^*(\vec{x},t) \, g(\hat{\vec{p}}) \, \psi(\vec{x},t) \qquad (6.48)
$$

Vorsicht! Was ist der Erwartungswert von $g(\vec{x},\vec{p})$?

Die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit können wir nun einfach als

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle 1 \rangle = 0$$

umschreiben. Die Zeitentwicklung allgemeiner Erwartungswerte $\langle A \rangle$ folgt als

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = i\hbar \int d^3x \left\{ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} A \psi + \psi^* A \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi \right\}$$

$$= \int d^3x \left\{ (-\hat{H} \psi^*) A \psi + \psi^* A \hat{H} \psi + i\hbar \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi \right\}$$

part. Int.

$$= \int d^3x \left\{ - \psi^* \hat{H} (A \psi) + \psi^* A \hat{H} \psi + i\hbar \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi \right\}$$

$$= \langle [A, \hat{H}] \rangle + i\hbar \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \qquad (6.49)$$

mit Kommutator

$$\boxed{[A, B] = A \cdot B - B \cdot A} \qquad (6.50)$$

und dem Hamiltonop.

$$\hat{H} = \hat{\vec{p}}^2 / 2m + V(x) \qquad (6.51)$$

Mit unserem Hamiltonoperator aus Gl. (6.51) mit

$\frac{\partial}{\partial t} V = \dot{V} = 0$ gilt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{H} \rangle = \langle [\hat{H}, \hat{H}] \rangle + i\hbar \langle \underbrace{\frac{\partial \hat{H}}{\partial t}}_{=0} \rangle = 0 \qquad (6.52)$$

für zeitunabhängige Hamiltonop. $\hat{H}$.

Der Erwartungswert $\langle \hat{H} \rangle =: E$ gibt uns die Energie des Zustandes $\Psi(\vec{x}, t)$. Um dies zu sehen, betrachten wir stationäre Zustände mit

$$\boxed{\dot{P} = 0} \qquad (6.53)$$

Mit Gl. (6.53) gilt

$$\Psi(\vec{x}, t) = \Psi(\vec{x}) \cdot e^{-i/\hbar \, E t} \qquad (6.54)$$

und damit ergibt die Schrödingergleichung

$$\boxed{E \, \Psi(\vec{x}) = \hat{H} \, \Psi(\vec{x})} \qquad (6.55)$$

die stationäre Schrödingergl. mit Energieeigenwerten E.