

3. Schrödingergleichung

Schrödinger 1926

20

Zeitabhängige Schrödingergl.

Erinnerung: Wellengl. für freie Teilchen

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

mit Korrespondenz

$$\hbar\omega = E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

↑

$$i\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\hat{\vec{p}}^2 = \left(\hbar \vec{\nabla}\right)^2 = -\hbar^2 \vec{\nabla}^2$$

Für Teilchen, das sich in Potential $V(\vec{r})$ bewegt ist

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

Hamilton-Op.

Schrödingergl. für Teilchen in Potential

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{Q}}) \right) \psi(\vec{r}, t)$$

mit Hamilton-Operator $\hat{H}$

$$\text{d.h. im Ortsraum } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$$

und Schrödingergl. in Kurzform:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

Schrödinger-glg. beschreibt zeitliche Entwicklung
des Wellenfkt.

(21)

DGL 1. Ordng in t , d.h. Lösg $\Psi(\vec{r}, t)$ für $t > 0$
aus Anfangsbed. $\Psi(\vec{r}, 0)$ folgt.

Bemerkung: Auch für Lösgen der S-glg. mit $V \neq 0$
gilt Kontinuitätsglg.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (*)$$

$$\text{mit } \rho = |\Psi|^2$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*)$$

(folgt aus Wellenglg. wie für freies Teilchen)

Aus (*) folgt $\int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \text{const.}$
(zeitlich)

Zeitunabhängige Schrödinger-glg.

Für $\hat{H}$ zeitunabh. (d.h. keine explizite t -Abhängigkeit),

Separationsansatz: $\Psi(\vec{r}, t) = f(t) \psi(\vec{r})$

Einsetzen in S-glg. $\Rightarrow i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} \psi(\vec{r}) = f(t) \hat{H} \psi(\vec{r})$

$$\Rightarrow \frac{i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t}}{f(t)} = \frac{\hat{H} \psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} = \text{const.} = E$$

rein t -abh. rein $\vec{r}$ -abh. $\Uparrow$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E f(t) \quad \text{und} \quad \hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Lösung für $f(t) = e^{-i \frac{Et}{\hbar}}$

(22)

$$\Rightarrow \int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \left(\int d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 \right) e^{-i \frac{t}{\hbar} \underbrace{(E - E^*)}_{2i \ln E}}$$

nn zeitl. const, wenn $\ln E = 0$, d.h. E reell ist.

$\Rightarrow$ zeitunabh. Schrödinger-Gl. (für $\hat{H}$ ohne explizite t -Abh.)

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{H} \Psi(\vec{r}) &= E \Psi(\vec{r}), \quad E = \text{reell} \\ \Psi(\vec{r}, t) &= e^{-i \frac{Et}{\hbar}} \Psi(\vec{r}) \end{aligned}}$$

$\hookrightarrow$ bezeichnet man als stationären Zustand für Zeitabhängigkeit reine Phase

Bemerkung: Für stationäre Zustände ist ρ und $\vec{j}$ t -unabh.

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

$\rightarrow \underline{\Psi(\vec{r})}$ ist Eigenfunktion von $\hat{H}$ mit Eigenwert E

Was ist E ? Betrachte Erwartungswert von $\hat{H}$

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= \int d^3r \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{H} \Psi(\vec{r}, t) \\ &= \int d^3r \Psi^*(\vec{r}) \underbrace{\hat{H} \Psi(\vec{r})}_{E \Psi} = E \int d^3r |\Psi^*(\vec{r})|^2 = E \end{aligned}$$

$\Rightarrow \underline{E}$ ist Energie des Zustands zunächst. (im Sinne des Erwartungswert, d.h. Mittelwert bei vielen Messungen)

Man sieht auch: Für stationären Zustand ist

$$(\Delta E)^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2 = E^2 - (E)^2 = 0$$

d.h. Schwankung um Mittelwert E ist 0 $\rightarrow$ für stat. Zust. kann Energie schon bestimmt werden

Lösung der zeitunabh. Schrödingergl. $\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$ (23)

mit Normierung $\int d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 = 1$

gibt mögliche Energiewerte E

→ später in Vorlesung mit Wasserstoffatom

diskrete mögliche E , ΔE aus Übergängen zwischen Zuständen
↳ Spektrallinien