3. Schrödingergleichung

Zeitabhängige Schrödingergl.

Wellengl. für freies Teilchen

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

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

$$\updownarrow \qquad\qquad \updownarrow$$

$$i\frac{\partial}{\partial t} \qquad \frac{(\hat{\vec{p}})^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}\psi$$

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

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

$\Rightarrow$ Schrödingergl. für Teilchen im Potential

Schrödinger 1926

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \underbrace{\left(\frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m} + V(\hat{\vec{Q}})\right)}_{\text{Hamilton-Operator } \hat{H}}\psi(\vec{r},t)}$$

(Hamiltonian)

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

und S-glg. in kurzform

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

- S-glg. → zeitl. Entwicklg der Wellenfkt

  DGL 1. Ordng in t, d.h. Lösung $\psi(\vec{r},t)$ durch Anfangsbed. $\psi(\vec{r},t=0)$ geg.

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

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

mit $\rho = |\psi|^2$

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

s. Übungsblatt

Aus Kontinuitätsglg. folgt $\int d^3r\, |\psi|^2 = \text{const.}$
Wellenfkt. bleibt unter t-Entw. normiert.

Zeitunabhängige Schrödingerglg.

für $\hat{H}$ (d.h. $V(\hat{Q})$) zeitunabhängig

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

Einsetzen in t-abh. S-glg.

$$\Rightarrow \quad i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}f(t)\right)\psi(\vec{r}) = \left(\hat{H}\psi(\vec{r})\right)f(t) \qquad \frac{1}{f\cdot\psi}$$

$$\Rightarrow \quad \underbrace{i\hbar\frac{\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)(t)}{f(t)}}_{\text{nur } t \text{ abh.}} = \underbrace{\frac{(\hat{H}\psi)(\vec{r})}{\psi(\vec{r})}}_{\text{nur } \vec{r} \text{ abh.}} = \text{Const.} = E$$

noch $E \in \mathbb{C}$

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

Lösung für $f(t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \Rightarrow \psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\,\psi(\vec{r})$

$$\Rightarrow \quad \underbrace{\int d^3r\, |\psi(\vec{r},t)|^2}_{\text{Gesamtws.} = 1} = \left(\int d^3r\, |\psi(\vec{r})|^2\right) e^{-\frac{i}{\hbar}t\underbrace{(E-E^*)}_{2i\,\mathrm{Im}E}}$$

nur zeitl. konst., wenn $\mathrm{Im}\,E = 0$, d.h. $E \in \mathbb{R}$

$\Rightarrow$ <u>zeitunabhängige Schrödingergleichung.</u>

$$\boxed{\begin{aligned} &\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad , E \in \mathbb{R} \\ &\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \end{aligned}}$$

$\hookrightarrow$ Zeitabh. ist reine Phase, $\psi(\vec{r})$ stationärer Zustand

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$$