16. Dezember 2008

EP III - Seminar

Schrödingergleichung

Wahrscheinlichkeit Bei der Schrödingergleichung handelt es sich im Allgemeinen um eine **Wellenfunktion**, die ein oder mehrere Teilchen beschreiben. Man nimmt hierfür dann zunächst den allgemeinen Ansatz einer sich zeitlich und räumlich ändernden Wellenfunktion an. Daraus folgt

$$\Psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

Umstellen liefert für die Schrödingergleichung zeitunabhängige Schrödingergleichung (s. Herleitung)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + E_{pot}\Psi = E\Psi$$

oder allgemeiner für dreidimensionale Probleme

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + E_{pot}\Psi = E\Psi}$$

Hierbei bezeichnet E_{pot} die potentielle Energie des Teilchens, E dessen Gesamtenergie und m dessen Masse, wobei mit Δ der Laplace-Operator gemeint ist. Anschaulich beschreibt diese Wellenfunktion in der Regel nichts. Doch beschreibt deren Betragsquadrat die Wahrscheinlichkeit eines Teilchens an einem bestimmten Ort zu sein. Somit ist

$$\boxed{W(x) = \left|\Psi^2(x)\right|}$$

Diese Tatsache ist zunächst einmal ein experimenteller Befund. Schrödinger stellte an die Wellenfunktion einige Forderungen. Diese lauten

- Ψ ist **global stetig**
- Ψ ist **global differenzierbar**
- $\int_{-\infty}^{\infty} \left|\Psi^2\right| dV \equiv 1$ (dies bedeutet, dass sich das Teilchen auf jeden Fall irgendwo aufhält)

Oft wird auch bei Schrödingergleichungen ein Seperationsansatz durchgeführt, indem man sagt

$$\Psi(x,t) = \Psi(x)\cdot\Psi(t) = \Psi(x)\cdot e^{-i\omega t}$$

Für die zeitabhängige Schrödingergleichung gilt die DGL

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

(Diese wurde in der Vorlesung und im Skript allerdings nicht verwendet und steht hier nur der Vollständigkeit halber)

freies Teilchen Für ein freies Teilchen (kein äußeres Potential) kann man im Allgemeinen eine ganz normale Wellengleichung annehmen. Somit ist die Schrödingergleichung für freie Teilchen gemäß der Form

$$\boxed{\Psi_{frei} = Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)}}$$

EP III - Seminar

Schrödingergleichung (Herleitungen)

Wahrscheinlichkeit (Ziel: Herleitung der stationären Schrödingergleichung) Betrachte zunächst den Standardansatz für Wellengleichungen. Dieser lautet

$$\Psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

Betrachte weiterhin zunächst ein Teilchen, welches lediglich über kinetische Energie und keine potentielle Energie verfügt. Dann gilt

$$E = E_{kin} + E_{pot} = E_{kin}$$

Mache nun den Ansatz einer Materiewelle, sodass auch dem Teilchen eine Wellenlänge und eine Frequenz zugeordnet werden kann.

$$E_{kin} = h\nu = \hbar 2\pi\nu = \hbar\omega$$

Somit gilt

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{E_{kin}}{\hbar} \\ &= \frac{p^2}{2m\hbar} \end{aligned} \tag{1}$$

Des weiteren macht man nun einen Ansatz des gequantelten Impulses. Dieser beläuft sich dann auf

$$\begin{aligned} p &= \hbar k \\ \Leftrightarrow k &= \frac{p}{\hbar} \end{aligned} \tag{2}$$

Setzt man diese beiden Werte in den Standardansatz ein, so erhält man

$$\Psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - \frac{p^2}{2m}t)}$$

Als nächstes betrachtet man die Darstellung von Ψ in der allgemeinen Wellenfunktion. Diese war (Erinnerung an „Grundlagen der Mechanik und E-Dynamik“)

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v_{phase}^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}$$

Setze nun Ψ in den linken Teil der Gleichung ein. Somit ergibt sich dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2 Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-\frac{p^2}{2m}t)}}{\partial x^2} \\ &= \frac{\partial^2 Ae^{\frac{ipx}{\hbar}}}{\partial x^2} && |\Psi(x) := Ae^{\frac{ipx}{\hbar}} \\ &= \frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} = \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2 \Psi(x) \\ &= -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi(x) = -\frac{p^2}{\hbar^2}\cdot\frac{2m}{2m}\Psi(x) && |E_{kin} = \frac{p^2}{2m} \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2}\cdot E_{kin}\Psi(x) \\ \Leftrightarrow E_{kin}\Psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} \end{aligned}$$

Die gleiche Lösung erhält man auch, wenn man direkt nur $\Psi(x)$ ableitet, wodurch sich dann

$$E_{kin}\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} \tag{3}$$

ergibt.

Als nächstes nutzt man die Beziehung

$$\begin{aligned} E &= E_{kin} + E_{pot} \\ \Leftrightarrow E_{kin}\Psi(x) + E_{pot}\Psi(x) &= E\Psi(x) \end{aligned} \tag{4}$$

Nun setzt man noch (3) ein und erhält unmittelbar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + E_{pot}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Beziehungsweise für stationäre Wellenfunktionen (Ψ ist nich von t abhängig)

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + E_{pot}\Psi = E\Psi}$$

freies Teilchen (Ziel: Herleitung Schrödingergleichung für ein freies Teilchen) Für ein freies Teilchen gilt zunächst

$$E_{pot} = 0$$

Daraus folgt, dass die gesamte Energie kinetische Energie ist und somit E ausgedrückt werden kann durch

$$E = E_{kin} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad |p = \hbar k$$

Setzt man dieses nun in die Schrödingergleichung ein, so erhält man

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + E_{pot}\Psi &= E\Psi \qquad |E_{pot} = 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} &= E\Psi \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\Psi \\ \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} &= -k^2\Psi \end{aligned}$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung hat dann die Form

$$\Psi_{frei} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Dies kann man dann ohne Veränderung der Ableitung nach x multiplizieren mit einem rein zeitabhängigen Term, wie $e^{-i\omega t}$. Somit folgt dann

$$\boxed{\Psi_{frei} = Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)}}$$