Die Schrödinger Gleichung

Eine Einführung

Christian Hirsch

Begriffserklärung

Was ist die Schrödingergleichung?

Begriffserklärung

Was ist die Schrödingergleichung?

Die Schrödingergleichung ist die Grundgleichung der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Sie beschreibt als Wellengleichung die zeitliche Entwicklung des Zustands eines unbeobachteten Quantensystems.
(Wikipedia)

Grundlagen

- Der Zustand eines Teilchens kann durch die Wellenfunktion $\psi(x)$ beschrieben werden.

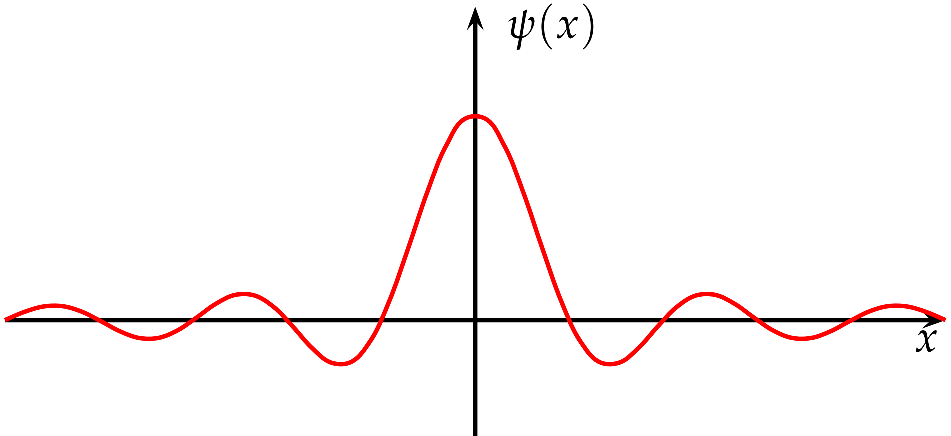
Grundlagen

- Der Zustand eines Teilchens kann durch die Wellenfunktion $\psi(x)$ beschrieben werden.
- $|\psi(x)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen am Ort x aufhält.

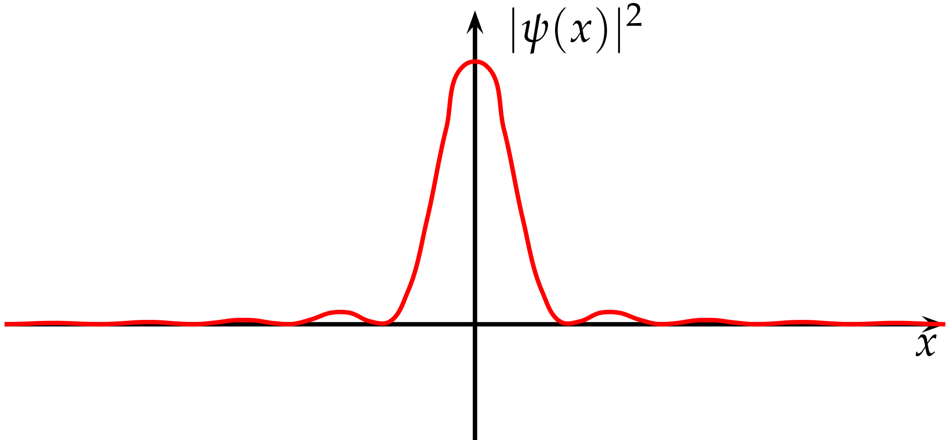
Grundlagen

- Der Zustand eines Teilchens kann durch die Wellenfunktion $\psi(x)$ beschrieben werden.
- $|\psi(x)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen am Ort x aufhält.
- $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$

Grundlagen

- Der Zustand eines Teilchens kann durch die Wellenfunktion $\psi(x)$ beschrieben werden.
- $|\psi(x)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen am Ort x aufhält.
- $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$
- 

Grundlagen

- Der Zustand eines Teilchens kann durch die Wellenfunktion $\psi(x)$ beschrieben werden.
- $|\psi(x)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen am Ort x aufhält.
- $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$
- 

Formel

- Nun zur zeitunabhängigen, eindimensionalen Schrödingergleichung

Formel

- Nun zur zeitunabhängigen, eindimensionalen Schrödingergleichung

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + E_{pot}\psi(x) = E_{ges}\psi(x)}$$

Herleitung?

- Fundament der Quantentheorie

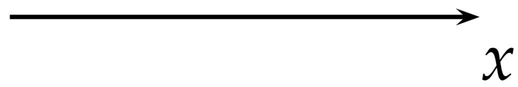
Herleitung?

- Fundament der Quantentheorie
- Keine Herleitung im eigentlichen Sinne möglich

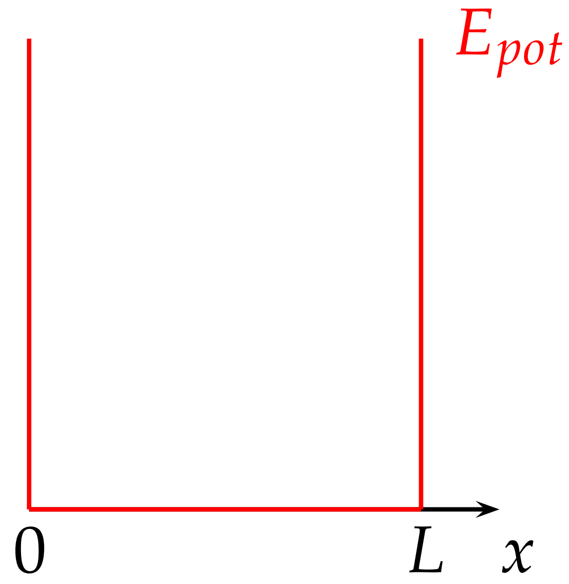
Herleitung?

- Fundament der Quantentheorie
- Keine Herleitung im eigentlichen Sinne möglich
- Allerdings: Plausibilitätsbetrachtungen möglich; z.B. Potentialtopf

Anwendung:Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden



Anwendung:Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden



Anwendung:Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

- Ein Teilchen besitzt im Bereich $(0; L)$ ein konstantes Potential

Anwendung:Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

- Ein Teilchen besitzt im Bereich $(0; L)$ ein konstantes Potential
- Wahl des günstigen Bezugssystem $\Rightarrow E_{pot} = 0$

Anwendung:Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

- Ein Teilchen besitzt im Bereich $(0; L)$ ein konstantes Potential
- Wahl des günstigen Bezugssystem $\Rightarrow E_{pot} = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + 0 \cdot \psi(x) = E_{ges}\psi(x)$$

Anwendung:Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

- Ein Teilchen besitzt im Bereich $(0; L)$ ein konstantes Potential
- Wahl des günstigen Bezugssystem $\Rightarrow E_{pot} = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E_{ges}\psi(x)$$

Probeansatz

- Probeansatz: $\psi(x) = A\sin(bx)$

Probeansatz

- Probeansatz: $\psi(x) = A\sin(bx)$
- $-\frac{\hbar^2}{2m}(A\sin(bx))'' = E_{ges}A\sin(bx)$

Probeansatz

- Probeansatz: $\psi(x) = A\sin(bx)$
- $-\frac{\hbar^2}{2m}(A\sin(bx))'' = E_{ges}A\sin(bx)$
- $\frac{\hbar^2}{2m}Ab^2\sin(bx) = E_{ges}A\sin(bx)$

Probeansatz

- Probeansatz: $\psi(x) = A\sin(bx)$
- $-\dfrac{\hbar^2}{2m}(A\sin(bx))'' = E_{ges}A\sin(bx)$
- $\dfrac{\hbar^2}{2m}Ab^2\sin(bx) = E_{ges}A\sin(bx)$
- $\dfrac{\hbar^2}{2m}b^2 = E_{ges}$

Nebenbedingungen

- $\psi(0) = 0,\ \psi(L) = 0$

Nebenbedingungen

- $\psi(0) = 0,\ \psi(L) = 0$
- $\psi(x) = A\sin(bx)$

Nebenbedingungen

- $\psi(0) = 0,\ \psi(L) = 0$
- $\psi(x) = A\sin(bx)$
- $bL = k\pi \ \Rightarrow \ b = \dfrac{k\pi}{L}$

Nebenbedingungen

- $\psi(0) = 0,\ \psi(L) = 0$
- $\psi(x) = A\sin(bx)$
- $bL = k\pi \ \Rightarrow \ b = \dfrac{k\pi}{L}$
- Einsetzen in $E_{ges} = \dfrac{\hbar^2}{2m}b^2 = \dfrac{h^2}{8\pi^2 m}b^2$

Nebenbedingungen

- $\psi(0) = 0,\ \psi(L) = 0$
- $\psi(x) = A \sin(bx)$
- $bL = k\pi \ \Rightarrow \ b = \dfrac{k\pi}{L}$
- Einsetzen in $E_{ges} = \dfrac{\hbar^2}{2m} b^2 = \dfrac{h^2}{8\pi^2 m} b^2$
- $E_{ges} = \dfrac{h^2 k^2}{8mL^2}$

Normierung

- $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$

Normierung

- $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$
- $\int_0^L A^2 \sin^2(bx) dx = 1$

Normierung

- $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$
- $\int_0^L A^2 \sin^2(bx) dx = 1$
- $A^2 \int_0^L \frac{1-\cos(2bx)}{2} dx = 1$

Normierung

- $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$
- $\int_0^L A^2 \sin^2(bx) dx = 1$
- $A^2 \int_0^L \frac{1 - \cos(2bx)}{2} dx = 1$
- $A^2 \left[\frac{x - (2\frac{k\pi}{L})^{-1} \sin\left(2\frac{k\pi}{L}x\right)}{2} \right]_0^L = 1$

Normierung

- $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$
- $\int_0^L A^2 \sin^2(bx) dx = 1$
- $A^2 \int_0^L \frac{1 - \cos(2bx)}{2} dx = 1$
- $A^2 \left[\frac{x - (2\frac{k\pi}{L})^{-1} \sin\left(2\frac{k\pi}{L}x\right)}{2} \right]_0^L = 1$
- $A^2 \frac{L}{2} = 1 \;\Rightarrow\; A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

Interpretation als stehende Welle

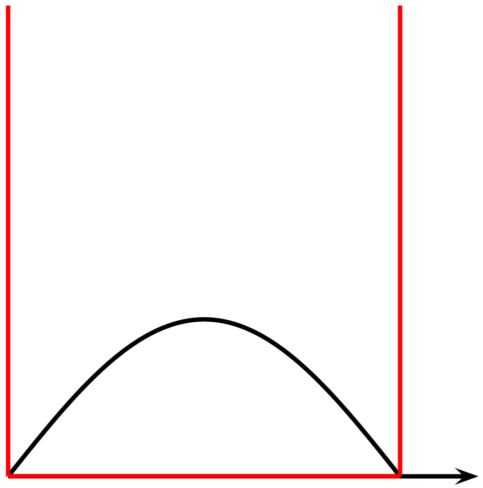
- Ergebnis der Schrödingergleichung
  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{k\pi}{L} x)$

Interpretation als stehende Welle

- Ergebnis der Schrödingergleichung
  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{k\pi}{L} x)$
- $\frac{k\pi}{L}\lambda = 2\pi \Rightarrow \lambda = \frac{2L}{k} \Rightarrow \frac{\lambda}{2}k = L$

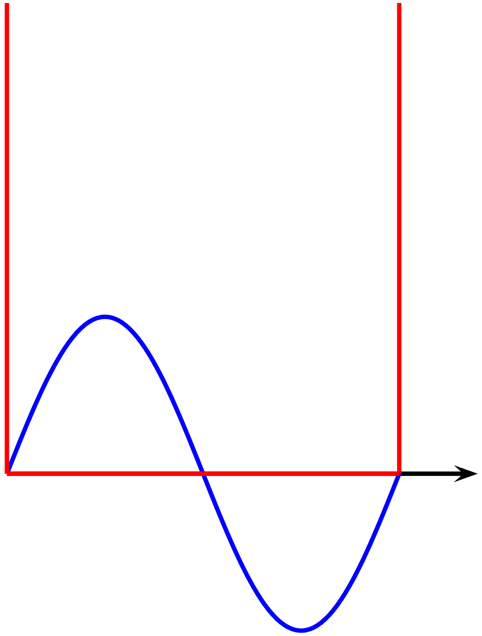
Interpretation als stehende Welle

- Ergebnis der Schrödingergleichung
  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{k\pi}{L} x)$
- $\frac{k\pi}{L}\lambda = 2\pi \;\Rightarrow\; \lambda = \frac{2L}{k} \;\Rightarrow\; \frac{\lambda}{2}k = L$



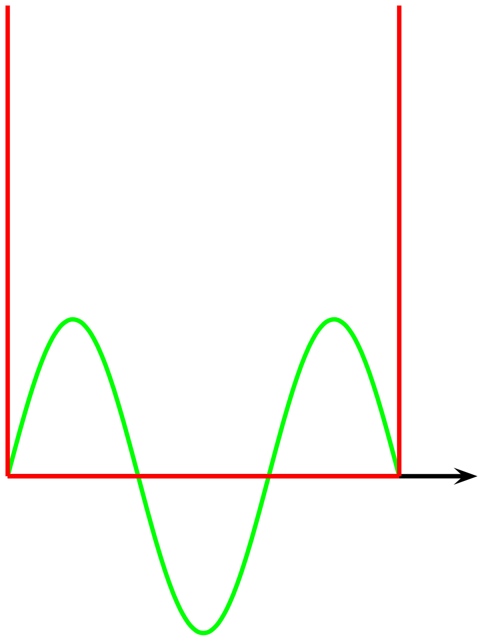
Interpretation als stehende Welle

- Ergebnis der Schrödingergleichung
  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{k\pi}{L} x)$
- $\frac{k\pi}{L}\lambda = 2\pi \;\Rightarrow\; \lambda = \frac{2L}{k} \;\Rightarrow\; \frac{\lambda}{2}k = L$



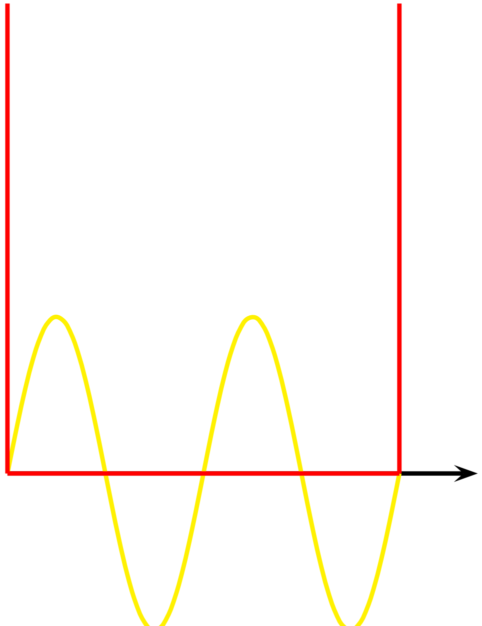
Interpretation als stehende Welle

- Ergebnis der Schrödingergleichung
  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{k\pi}{L} x)$
- $\frac{k\pi}{L}\lambda = 2\pi \;\Rightarrow\; \lambda = \frac{2L}{k} \;\Rightarrow\; \frac{\lambda}{2}k = L$



Interpretation als stehende Welle

- Ergebnis der Schrödingergleichung
  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{k\pi}{L} x)$
- $\frac{k\pi}{L}\lambda = 2\pi \;\Rightarrow\; \lambda = \frac{2L}{k} \;\Rightarrow\; \frac{\lambda}{2}k = L$



Kinetische Energie

- Untersuchung des Terms $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)$:

Kinetische Energie

- Untersuchung des Terms $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)$:
- $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{k\pi}{L}x))''$

Kinetische Energie

- Untersuchung des Terms $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)$:
- $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{k\pi}{L}x))''$
- $= \frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{k^2\pi^2}{L^2}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{k\pi}{L}x) = \frac{h^2}{8m}\frac{k^2}{(k\frac{\lambda}{2})^2}\psi(x)$

Kinetische Energie

- Untersuchung des Terms $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)$:
- $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{k\pi}{L}x))''$
- $= \frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{k^2\pi^2}{L^2}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{k\pi}{L}x) = \frac{h^2}{8m}\frac{k^2}{(k\frac{\lambda}{2})^2}\psi(x)$
- $\frac{h^2}{2\lambda^2 m}\psi(x) = \frac{p^2}{2m}\psi(x) = E_{kin}\psi(x)$

Fazit des Gedankenversuchs

- Nur ganz bestimmte, diskrete Werte für E_{ges} möglich (*Eigenwerte*)

Fazit des Gedankenversuchs

- Nur ganz bestimmte, diskrete Werte für E_{ges} möglich (*Eigenwerte*)
- Bei anderen Werten: Divergenz im unendlichen

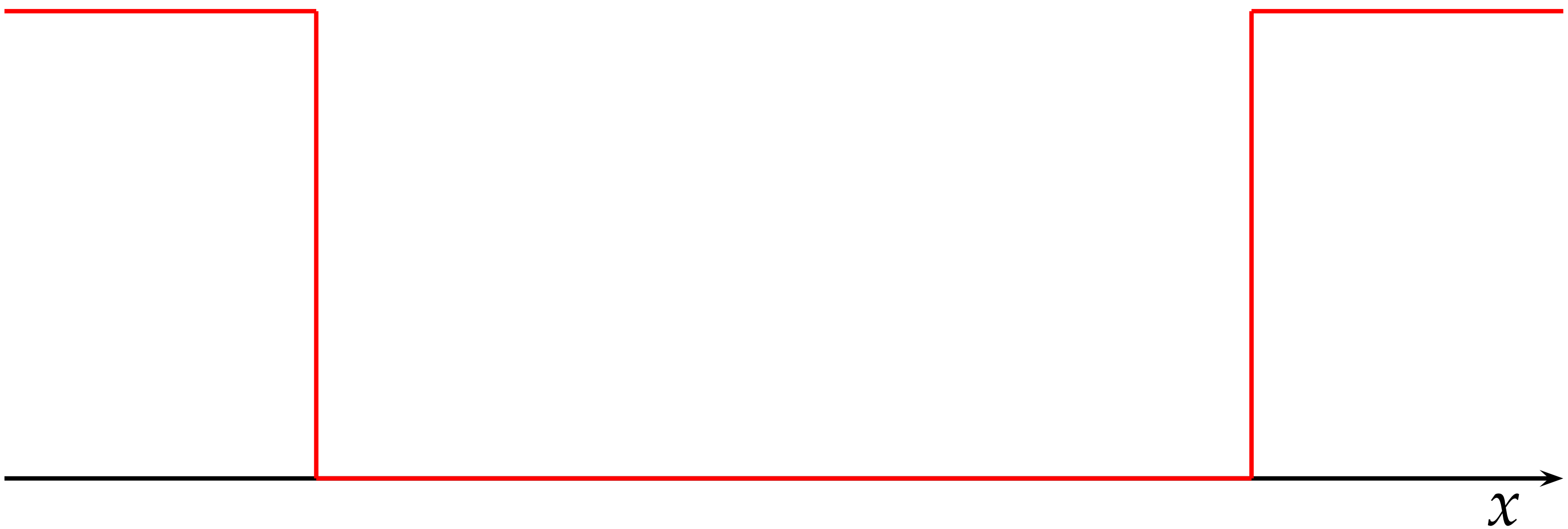
Fazit des Gedankenversuchs

- Nur ganz bestimmte, diskrete Werte für E_{ges} möglich (*Eigenwerte*)
- Bei anderen Werten: Divergenz im unendlichen
- Komplexitätssteigerung bei mehrdimensionalen, zeitabhängigen Prozessen

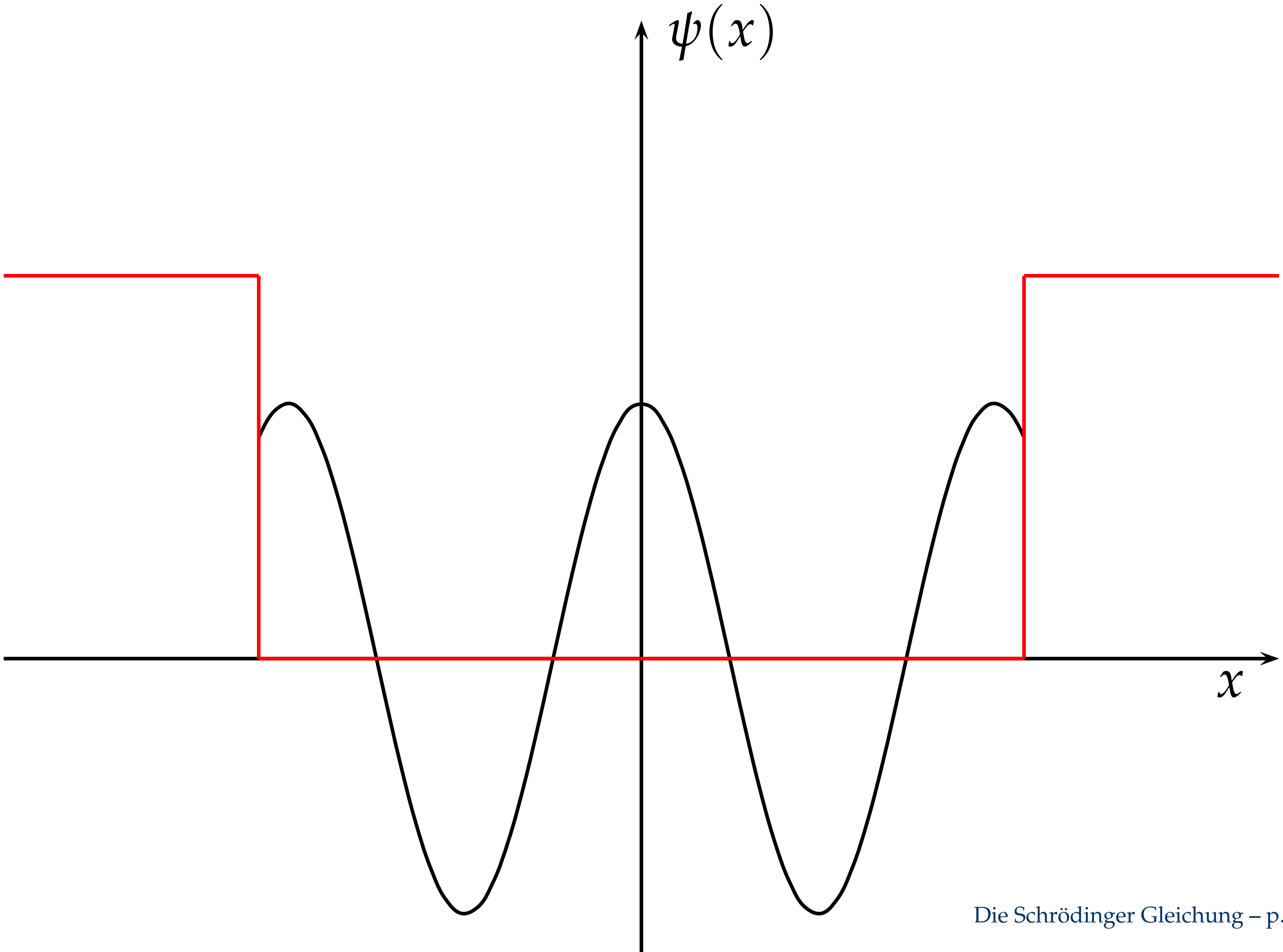
Fazit des Gedankenversuchs

- Nur ganz bestimmte, diskrete Werte für E_{ges} möglich (*Eigenwerte*)
- Bei anderen Werten: Divergenz im unendlichen
- Komplexitätssteigerung bei mehrdimensionalen, zeitabhängigen Prozessen
- Oft keine Lösung in geschlossener Form möglich

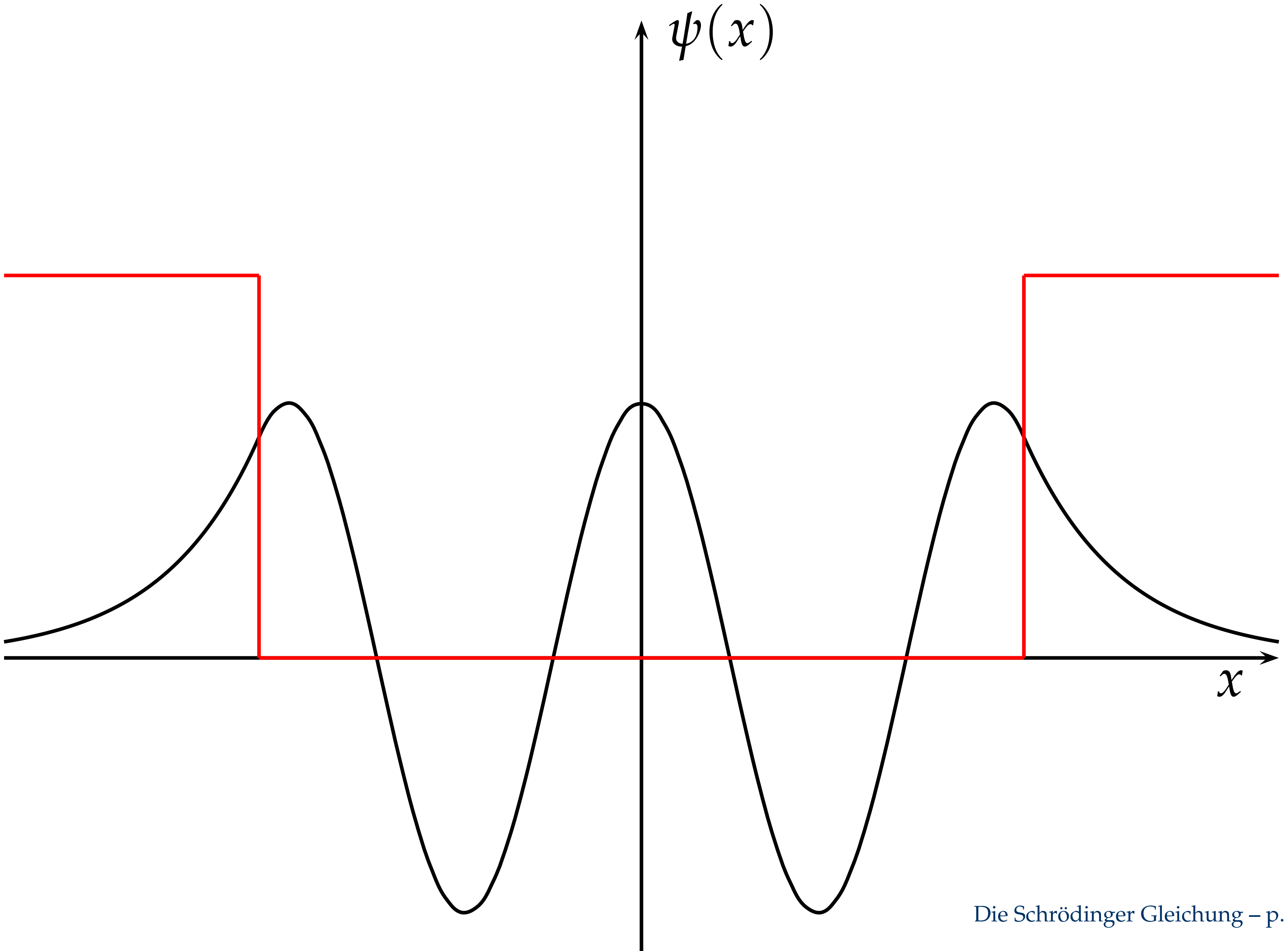
Ausblicke: Endlicher Potential-topf



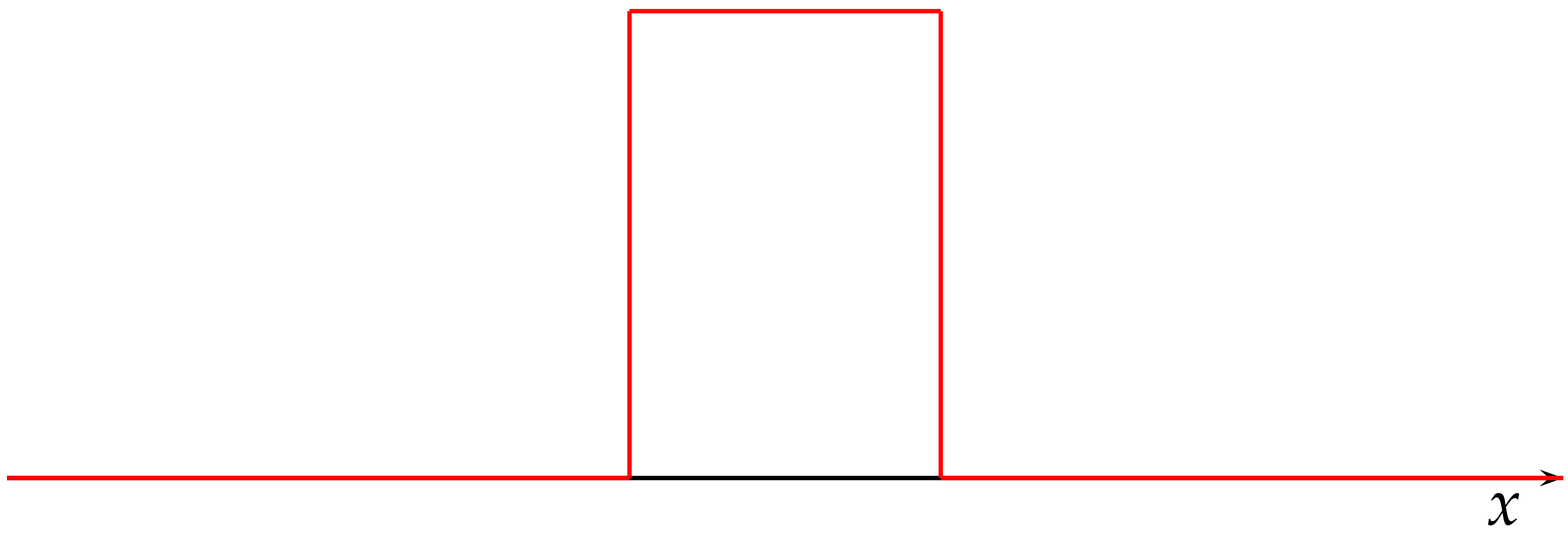
Ausblicke: Endlicher Potentialtopf



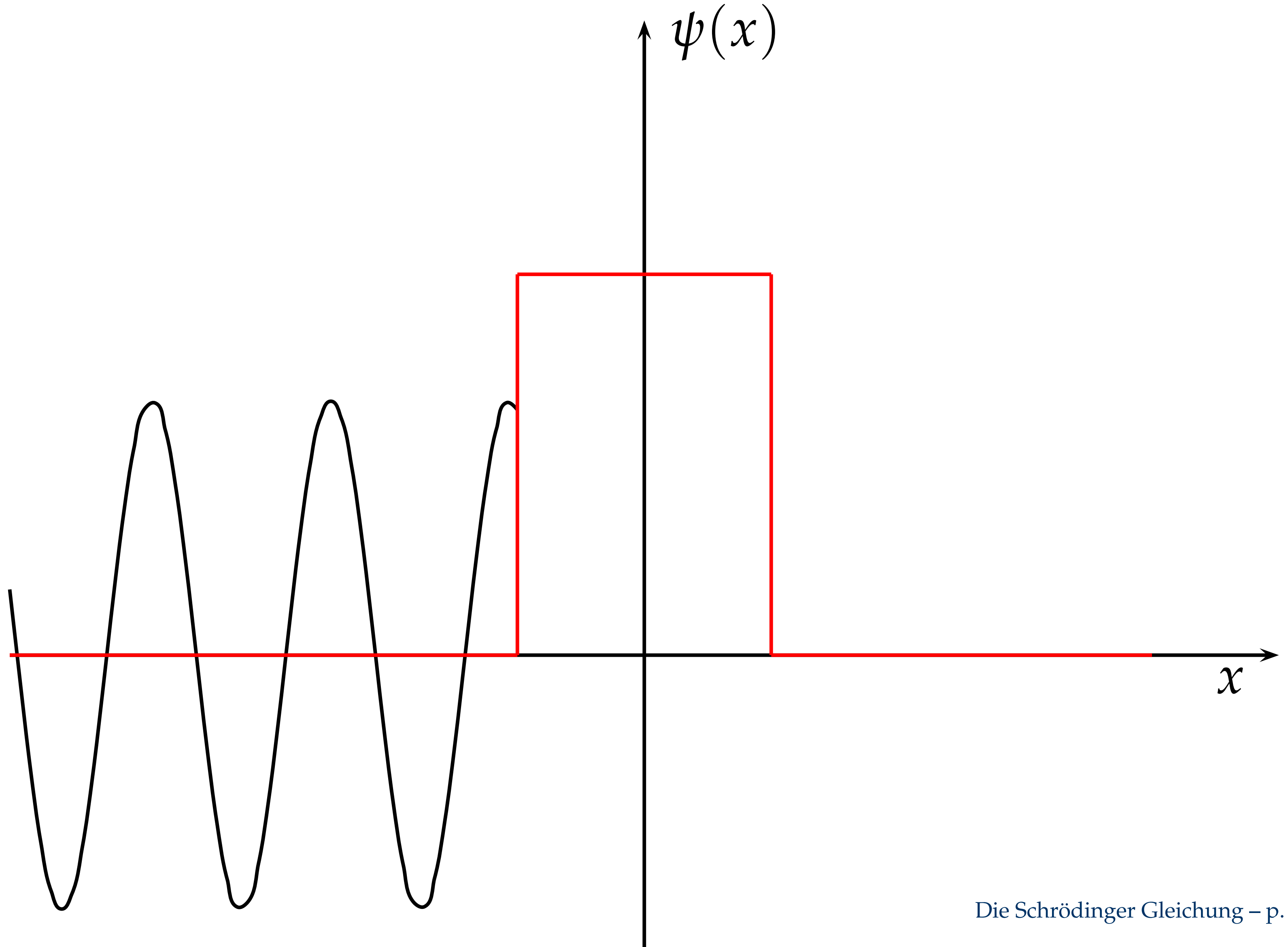
Ausblicke: Endlicher Potential-topf



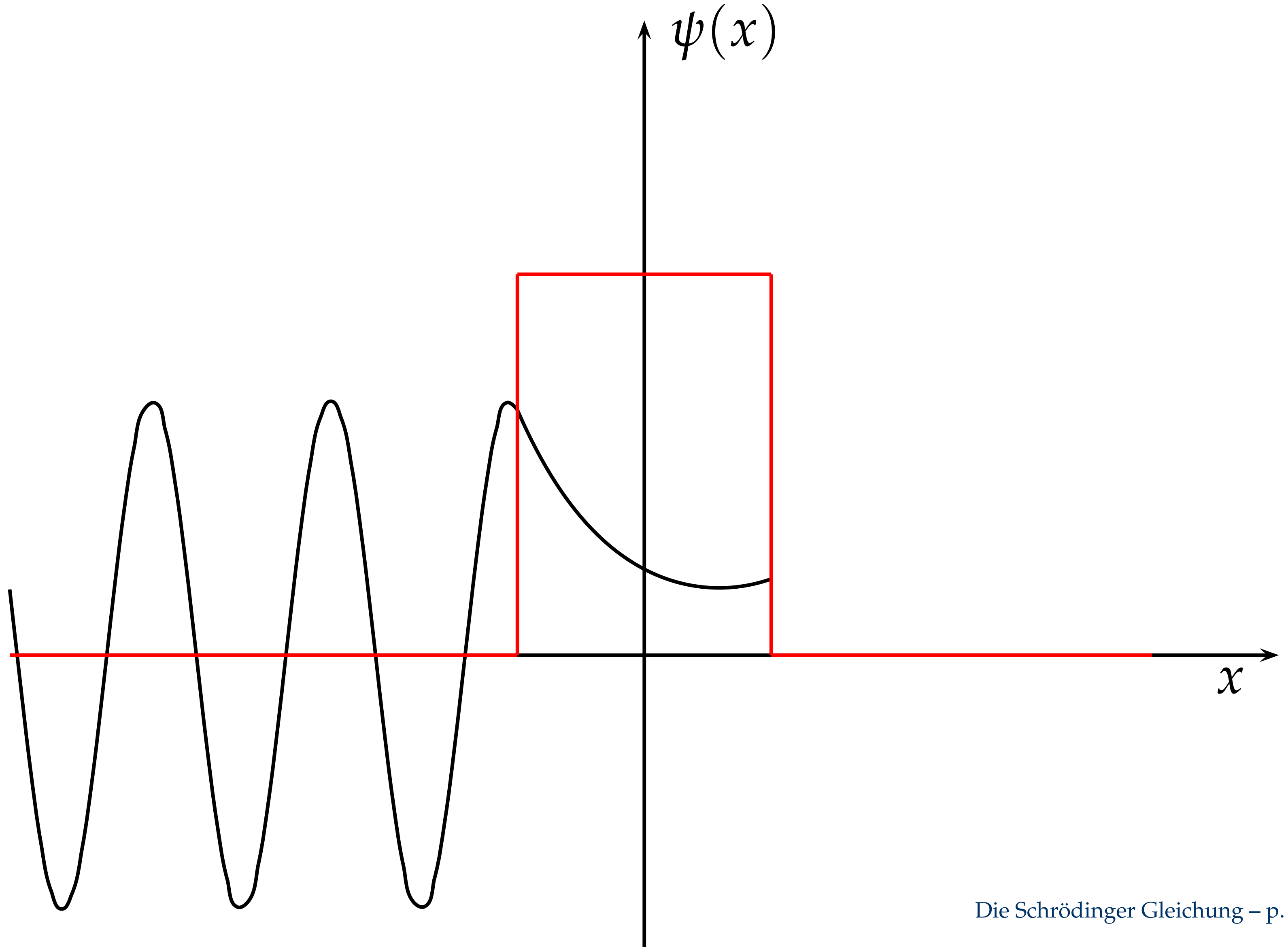
Ausblicke: Tunneleffekt



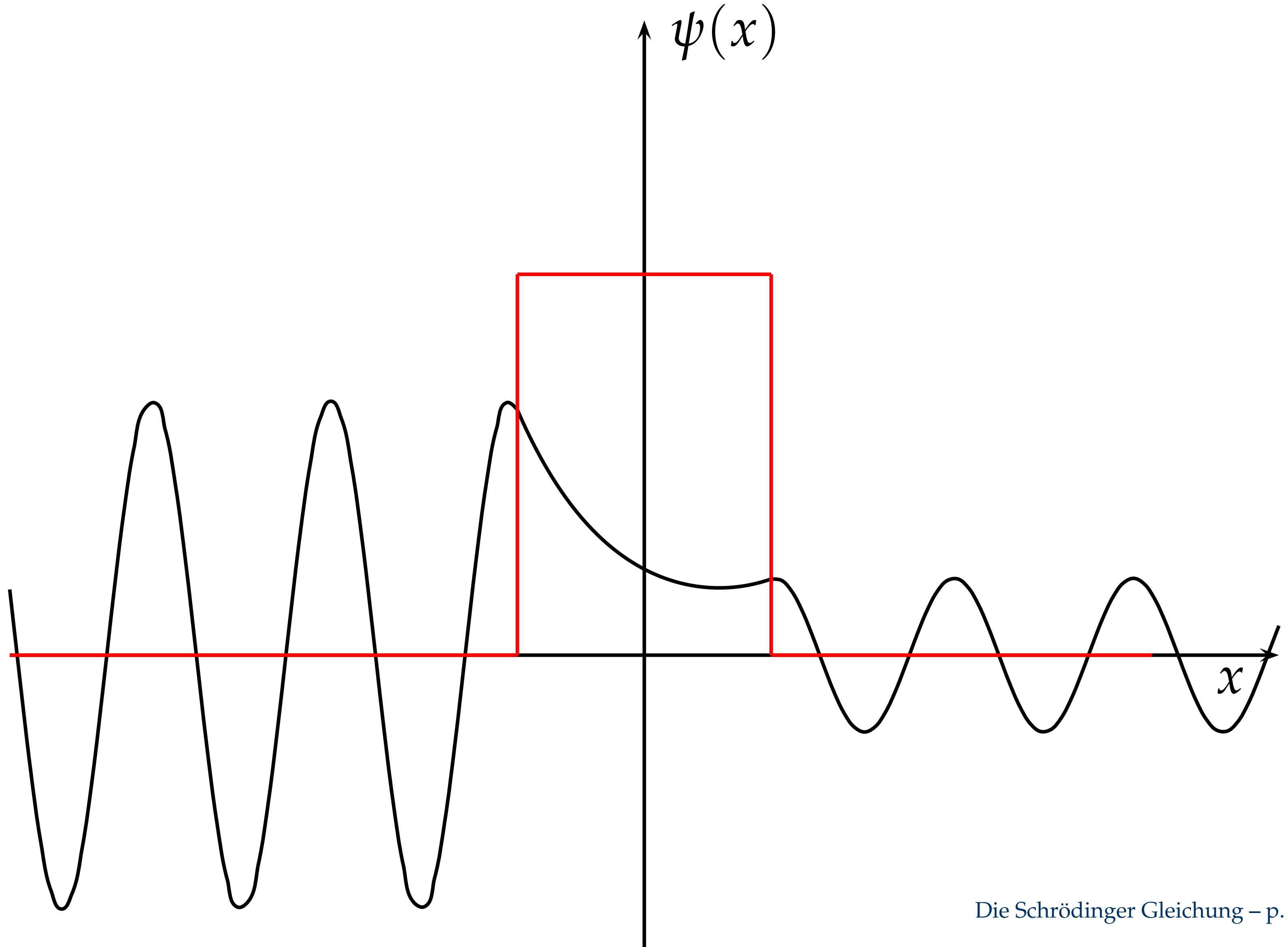
Ausblicke: Tunneleffekt



Ausblicke: Tunneleffekt



Ausblicke: Tunneleffekt



Für Spielereien

www.schulphysik.de/java/physlet/applets/quant2.html

http://www.cip.physik.uni-muenchen.de/~milq/kap10/images/slange.exe

http://www.cip.physik.uni-muenchen.de/~milq/kap10/images/wippe.exe

http://phys.educ.ksu.edu/vqm/