Die Schrödingergleichung

Vortrag im Rahmen der Vorlesung zu Spektralmethoden

Magdalena Sigg   Wanja Chresta

20. Mai 2008

Zusammenfassung

Die Schrödingergleichung ist *die zentrale Gleichung der Quantenmechanik*. Mit ihrer Hilfe werden Teilchen in gegebenen Potentialen, unter Berücksichtigung quantenmechanischer Effekte beschrieben.

1. Einführung
   - Ein erster Blick
   - Geschichte
   - Die Schrödingergleichung im Detail
2. Lösung der Schrödinger Gleichung
   - Allgemeine Lösung
   - Lösung für ein kugelsymmetrisches Potential
3. Beispiel

Ein erster Blick

Die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,t) + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$$

- Fundament der Quantenmechanik
- Postulat, also nicht hergeleitet
- Entspricht der Bewegungsgleichung der klassischen Mechanik
- Lösungen der SG beschreiben Teilchen

Geschichte - Erwin Schrödinger

Abbildung: Erwin Schrödinger (1887-1961)

- Österreichischer Physiker aus Wien
- Professor für Theoretische Physik in Zürich (nach Einstein)
- Nobelpreis 1933 für seine Arbeiten in der Quantenphysik

Geschichte

- SG von Erwin Schrödinger 1926 aufgestellt
- Max Born interpretiert 1926 die SG statistisch
- 1928 Beschreibung der Wasserstoff-Orbitale mit Hilfe der SG

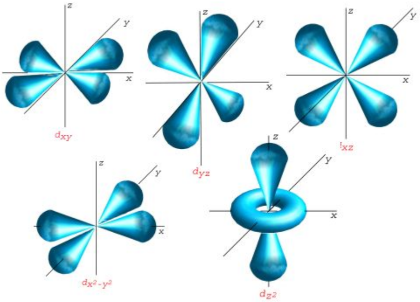

Abbildung: Einige Orbitale des Wasserstoffatoms

Die Schrödingergleichung im Detail

Die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$\underbrace{(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x,t))}_{\hat{H}}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$$

$$\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$$

- Lösungen $\Psi(x,t)$ heissen Wellenfunktionen
- Betragsquadrat der Wellenfkt $|\Psi(x,t)|^2$ entspricht Aufenthalts-Wahrscheinlichkeitsdichte des Teilchens.
- Deshalb normierung der Lösungen: $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1$

Die Schrödingergleichung im Detail

Die zeitunabhängige / stationäre Schrödingergleichung

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right)}_{\hat{H}}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

- Stationäre SG ist ein Eigenwertproblem
- Eigenwerte E entsprechen Energien der beschriebenen Teilchen, analog zum Hamiltonoperator der klassischen Physik

Mathematische Bemerkungen

- Die Schrödingergleichung in der Mathematik:

$$i\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = f(u), \quad u|_{t=0} = u_0$$

- Zur Behandlung betrachtet man im Allgemeinen Sobolevräume

Schrödinger Gleichung für stationäre Probleme

Lösung: $\Psi(x,t) = \Phi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}(Et)}$

$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2M}\triangle\Phi(x) + V(x)\Phi(x) = E\Phi(x)$

(meistens nicht analytisch lösbar)

$\rightarrow$ Energieeigenwerte E_n, Eigenfunktionen $\Phi_n(x)$

- Jedes Problem ist durch $V(x)$ und durch die Anfangs- und Randbedingungen bestimmt.

Wellenpaket

Definition

Ein Wellenpaket ist ein räumlich und zeitlich begrenztes System von Wellen. Mehrere einfache Wellen werden überlagert. Eine einfache Welle hat eine unendliche Ausbreitung. Die Amplitude eines Wellenpakets hat nur in einem räumlich eng begrenztem Bereich Werte verschieden von Null.

- Die Frequenzverteilung erhält man durch Fouriertransformation.
- Das Wellenpaket erfüllt die Wellengleichung.

Wellenpaket

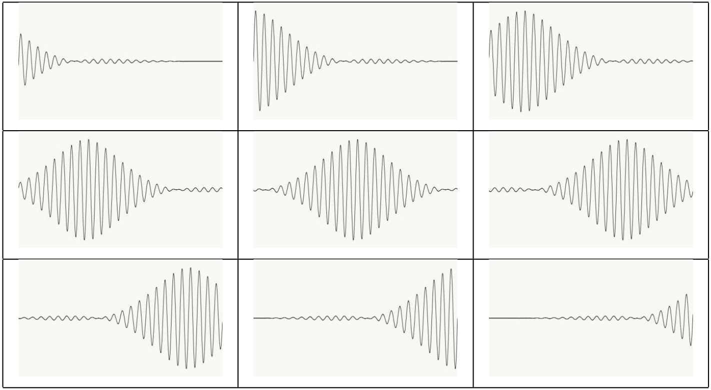

Abbildung: Wellenpaket ohne Dispersion

Superpositionsprinzip

Superpositionsprinzip

Lösungen können linear überlagert werden

$\Rightarrow$ allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger Gleichung:

$$\Psi(x,t) = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n t)} \Phi_n(x)$$

Wellenpaket!

oder:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} a(k) e^{-i\omega t} \Phi_k(x) dk$$

Kugelsymmetrisches Potential

$V(r) = -\frac{c}{r}, \;\; c > 0$ $\;\longrightarrow$ stationäres Problem SG:
$\triangle\Phi(r) + \frac{2M}{\hbar^2}(E + \frac{c}{r})\Phi(r) = 0$

Ansatz: $\Phi(r, \phi, \vartheta) = R(r)f(\phi, \vartheta)$
$\longrightarrow$ Winkelanteil $Y_l^m(\phi, \vartheta), \;\; l = 0, 1, ..., \;\; m = -l, ..., l$
Radialanteil $R_{n,l} = N_{n,l}e^{-ar}r^l L_{n-l-1}^{2l+1}(r), \;\; l < n, \;\; a$ konstant
(Laguerre Polynome: $L_k^{2l+1} = e^r r^{-(2l+1)} \frac{d^k}{dr^k}(r^{k+2l+1}e^{-r})$)

$\Rightarrow \Phi_{n,l,m}(r, \phi, \vartheta) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\phi, \vartheta)$

also

$$\Psi(r, t) = \sum_{n,l,m} a_{n,l,m} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\Phi_{n,l,m}(r)$$

Und mit Matlab?

Tunneleffekt

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x \in [-a, a], a > 0 \\ 0, & sonst \end{cases}$$

$$u(x, t = 0) = \frac{2}{\pi a^2} exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) exp\left(ik_0 x\right)$$

Und mit Matlab?

Wir lösten:

$$-\triangle u(x,t) - |u(x,t)|^2 u = i\frac{\partial}{\partial t}u(x,t)$$

$$u(x,t=0) = \frac{1}{1+sin(x)^2}$$

und:

$$-\triangle u(x,t) - 2|u(x,t)|^2 u = i\frac{\partial}{\partial t}u(x,t)$$

$$u(x,t=0) = \pi\sqrt{2}\,(1+0.1cos(x))$$

(mit einer Fourier-Kollokationsmethode)