3. Schrödingergleichung f. Teilchen im freien Raum

3.1. Formulierung

1926 E. Schrödinger

Teilchen soll mit Wellenfunktion beschrieben werden $\Psi(\vec{r},t)$

Annahmen im Einklang mit Beobachtung:

a) Interferenz von Elektronenwellen, also Superpositionsprinzip

wenn Ψ_1 und Ψ_2 Lösungen sind $\rightarrow$ $\Psi_1 + \Psi_2$ soll auch Lösung sein

also: $\Psi = \Psi_0\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$, $\vec{k}$ - Wellenvektor

b) möglichst einfach $\rightarrow$ aus Anfangsverteilung $\Psi(\vec{r},0)$ soll Lösg. bestimmt

Dgl. 1. Ordnung in Zeit für $\Psi(\vec{r},t)$

c) de Broglie Beziehungen sollen gelten:

$$\vec{p} = \hbar\vec{k},\ E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} = \hbar\omega \rightarrow \Psi(\vec{r},t) = \Psi_0\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} = \Psi_0\, e^{i\left(\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar} - \frac{E}{\hbar}t\right)}$$

$$i)\quad \partial_t \Psi = \Psi_0\, e^{i\left(\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar} - \frac{E}{\hbar}t\right)} \cdot \left(-\frac{i}{\hbar}E\right) = -\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\Psi$$

$$ii)\quad \vec{\nabla}_r^{\,2}\Psi = \Delta\Psi = -\frac{1}{\hbar^2}\vec{p}^{\,2}\Psi$$

$$\Delta = \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}$$

$$\underbrace{\text{aus } i)\quad \partial_t \Psi = -\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\Psi, \quad \text{aus } ii)\quad \Delta\Psi = -\frac{1}{\hbar^2}\vec{p}^{\,2}\Psi}$$

$$\boxed{i\hbar\,\partial_t \Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m}\Psi(\vec{r},t)}$$

Schrödingergl. f. freie Teilchen, partielle Dgl.

$\Delta = \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}$

$\Psi(\vec{r},t)$: komplexwertig

3.2. Zur Interpretation der Schrödingergleichung

- wo ist das Teilchen, was bedeutet $\Psi(\vec{r},t)$

a) Max Born, 1926: Wahrscheinlichkeitsinterpretation –

$|\Psi(\vec{r},t)|^2$ ist Maß f. die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

des beschriebenen Objekts

$\rightarrow$ $|\Psi(\vec{r},t)|^2 \, dV$ definiert Wahrscheinlichkeit das Teilchen im Volumen dV zur Zeit t zu finden:

Volumenelement

$\rightarrow$ Normierung d. Wahrscheinlichkeit: $\int\limits_{\text{ganzer Raum}} dV \, |\Psi(\vec{r},t)|^2 = 1$

$\rightarrow$ Wahrscheinlichkeit w_0 in V_0 $\int\limits_{V_0} dV \, |\Psi(\vec{r},t)|^2 = w_0$

Born: Ich bin mir bewußt den Determinismus im atomaren Bereich aufzugeben.

b) Stützen der Wahrscheinlichkeitsinterpretation

i) Kontinuitätsgleichung:

$$i\hbar \dot{\Psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}\Psi \quad \Big| \; \Psi^* \cdot$$

$$-i\hbar \dot{\Psi}^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}\Psi^* \quad \Big| \cdot \Psi$$

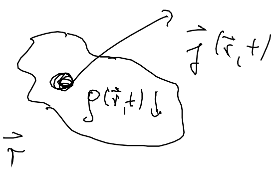
Differenz der Gleichungen nehmen

$$i\hbar\,\partial_t |\psi|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^* \vec\nabla\cdot\vec\nabla\psi - c.c.\right)$$

$$\underbrace{\partial_t |\psi|^2}_{\rho(\vec r,t)} = -\vec\nabla\cdot\underbrace{\left(\psi^*\frac{1}{2m}\frac{\hbar}{i}\vec\nabla\psi + c.c.\right)}_{\vec j(\vec r,t)}$$

Wahrscheinlichkeitsdichte   Wahrscheinlichkeitsstrom

$$\partial_t \rho + \vec\nabla\cdot\vec j = 0$$

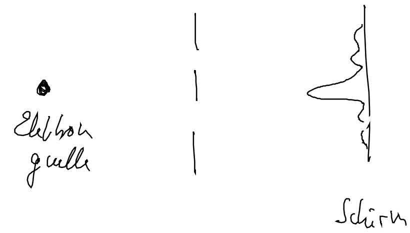


Kontinuitätsgleichung f. Wahrscheinlichkeitsdichte

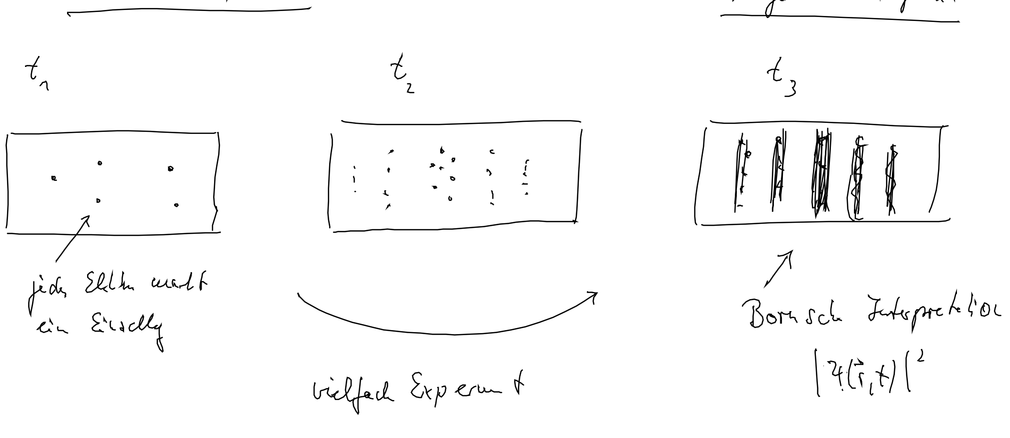
ii) Bezug zum Experiment:

Analyse von Interferenzmuster auf Photoplatte

Doppelspaltexperiment zu verschied. Belichtungszeiten:



kurze Belichtungszeit ⟶ lange Belichtungszeit



Kopenhagener Deutung (1927 Bohr, Heisenberg)

1) Die Wellenfunktion gibt die vollständigst mgl. Festlegung d. Quantenzustands wieder.

2) Die Übertragung eines einzelnen Quants auf Messapparatur ist unkontrollierbar und nicht analysierbar

3) Prinzipiell sind nur Wahrscheinlichkeitsaussagen über den Ausgang vieler Experimente möglich.