Die Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung ist (vereinfacht gesagt) die „Bewegungsgleichung“[1] für Quantenobjekte. Die folgenden Berechnungen beschränken sich, der mathematischen Einfachheit wegen, vorerst auf eindimensionale Betrachtungen. Mit dem nötigen mathematischen „Rüstzeug“ lassen sich jedoch alle Überlegungen auf drei Dimensionen verallgemeinern.

1 Klassische Wellenlehre – Wellengleichung und Dispersionsrelation

Als Vorprogramm betrachten wir den Zusammenhang zwischen linearer eindimensionaler Wellengleichung, der zugehörigen Lösung und der sogenannten Dispersionsrelation. Die Ausbreitung von Wellen in einem homogenen Medium wird in erster Näherung mit $y = y(x,t)$ durch die sogenannte Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \tag{1}$$

beschrieben, wobei $y(x,t)$ die Auslenkung des betrachteten Mediums am Ort x zum Zeitpunkt t und c die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Welle bezeichnen[2].

Die einfachste Lösung der Wellengleichung ist eine Sinuswelle der Bauform

$$y(x,t) = y_0 \sin(\omega t - kx), \tag{2}$$

wobei y_0 die Amplitude, ω die Kreisfrequenz und k die Kreiswellenzahl bezeichnen. Durch jeweils zweimalige Differentiation von (2) nach der Zeit t und (unabhängig davon) nach dem Ort x sowie Einsetzen in (2) kann man überprüfen, dass (2) die Gleichung (1) tatsächlich erfüllt. Es gilt

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = \frac{\partial^2}{\partial t^2}\left(y_0 \sin(\omega t - kx)\right) = -\omega^2 \underbrace{y_0 \sin(\omega t - kx)}_{=y} = -\omega^2 y \tag{3}$$

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(y_0 \sin(\omega t - kx)\right) = -k^2 \underbrace{y_0 \sin(\omega t - kx)}_{=y} = -k^2 y \tag{4}$$

$$(1) \Rightarrow -\omega^2 y = -c^2 k^2 y \tag{5}$$

$$\omega = c\,k \tag{6}$$

Den letzten Zusammenhang nennt man in der Physik *Dispersionsrelation*. Sie beschreibt den Zusammenhang zwischen dem Ablauf eines Vorganges bzw. Prozesses (Frequenz, Energie) und den Eigenschaften der ihn beschreibenden Größen (Kreiswellenzahl, Wellenlänge, Impuls und Ausbreitungsgeschwindigkeit). In der Grundlagen- oder Schulphysik kennt man die Gleichung in anderer Gestalt: Setzt man $\omega = 2\pi f$ und $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ in (6) ein, erhält man nach entsprechender Umformung

$$2\pi f = c\,\frac{2\pi}{\lambda}, \tag{7}$$

$$c = \lambda\, f, \tag{8}$$

die Grundgleichung der Wellenlehre.

[1] Die Anführungszeichen sollen drauf hindeuten, dass es sich bei der Schrödinger-Gleichung nicht um eine Bewegungsgleichung im Sinne der klassischen Mechanik vom Typ $m\,a = \sum F$ handelt.

[2] Eine entsprechende Herleitung zeigt, dass bei einer Seilwelle $c = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho}}$ gilt, wobei σ die Spannung im Seil/in der Saite und ρ die Dichte symbolisieren.

Zusammenfassung und Folgerung: Betrachtet man die Ausbreitung einer Welle, so wird diese physikalisch durch eine Bewegungsgleichung (=Wellengleichung) beschrieben. Löst man die Bewegungsgleichung und setzt man die Lösung in die Bewegungsgleichung ein, erhält man die Dispersionsrelation. Im Folgenden werden wir diese Vorgangsweise umkehren. D.h., dass wir mit bereits bekannten Zusammenhängen der Quantenmechanik die Dispersionsrelation für Wahrscheinlichkeitswellen, die das Verhalten von Quantenobjekten beschreiben, aufstellen. Mit der einfachsten Form einer Welle werden wir anschließend auf die zugehörige Bewegungsgleichung (=Schrödinger-Gleichung) rückschließen.

2 Die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen

In diesem Abschnitt wird ein Spezialfall der Schrödinger-Gleichung „hergeleitet". Auf ein freies Quantenobjekt/Teilchen wirken keinerlei Kräfte ein. Hieraus folgt, dass die „hergeleitete" Schrödinger-Gleichung kein (zu einer Kraft gehöriges) Potenzial V enthält (=Spezialfall, der im folgenden Abschnitt erweitert wird).

Wir gehen hierfür von der Energiebeziehung für ein Photon

$$E = hf = \underbrace{\frac{h}{2\pi}}_{=\hbar}\underbrace{2\pi f}_{=\omega} = \hbar\omega \tag{9}$$

und der de Broglie-Beziehung

$$p = \frac{h}{\lambda} = \underbrace{\frac{h}{2\pi}}_{=\hbar}\underbrace{\frac{2\pi}{\lambda}}_{=k} = \hbar k \tag{10}$$

aus. Hierin bezeichnen E die Energie, h das Plancksche Wirkungsquantum, f die Frequenz, ω die Kreisfrequenz, p den Impuls, λ die Wellenlänge und k die Kreiswellenzahl.

Ein Teilchen mit einer Masse m und einer nichtrelativistischen Geschwindigkeit v hat eine kinetische Energie (ausgedrückt durch den zugehörigen Impuls p) von

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{(\overbrace{mv}^{=p})^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}. \tag{11}$$

Setzt man (9) und (10) in (11) ein, erhält man

$$\hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m}. \tag{12}$$

Dividiert man die so erhaltene Gleichung durch $\hbar$, ergibt sich daraus unmittelbar die sogenannte Dispersionsrelation

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}. \tag{13}$$

Das sich frei bewegende Teilchen wird quantenmechanisch durch eine (Wahrscheinlichkeits-)Welle mit der Wellenfunktion $\Psi = \Psi(x,t)$ beschrieben. Die einfachste Form einer Welle ist eine harmonische Welle, ihre komplexe Darstellung lautet[3]

$$\Psi(x,t) = \Psi_0\, e^{-i(\omega t - kx)}, \tag{14}$$

[3]Der Zusammenhang mit der bekannten „sin-Schreibweise" kann mittels der Euler-Formel $e^{iz} = \cos(z) + i\sin(z)$ hergestellt werden.

wobei Ψ_0 die Amplitude bezeichnet. Die Wellenfunktion Ψ muss die „Bewegungsgleichung“ (=Schrödinger-Gleichung) erfüllen. Gleichzeitig muss auch die Dispersionsrelation durch die Bewegungsgleichung gegeben sein. Um diese Bewegungsgleichung zu ermitteln, leiten wir (14) einmal nach der Zeit t und (getrennt davon) zweimal nach dem Ort x ab. Man erhält

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi_0\, e^{-i(\omega t - kx)}\right) = -i\omega\, \underbrace{\Psi_0\, e^{-i(\omega t - kx)}}_{=\Psi} = -i\omega\,\Psi, \tag{15}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\Psi_0\, e^{-i(\omega t - kx)}\right) = -k^2\, \underbrace{\Psi_0\, e^{-i(\omega t - kx)}}_{=\Psi} = -k^2\,\Psi. \tag{16}$$

Aus den letzten beiden Zusammenhängen berechnet man ω bzw. k^2

$$\omega = \frac{1}{-i\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial t}, \tag{17}$$

$$k^2 = \frac{1}{-\Psi}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \tag{18}$$

und setzt die Ergebnisse in die Dispersionsrelation (13) ein, so erhält man nach einer entsprechenden Umformung

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}. \tag{19}$$

Multipliziert man diese Beziehung mit $\hbar$, erhält man die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen (in ihrer „Standardform“)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi. \tag{20}$$

Durch unsere Vorgangsweise ist somit gewährleistet, dass die Wellenfunktion Ψ die Schrödinger-Gleichung erfüllt und gleichzeitig die Dispersionsrelation (13) gültig ist.

Bemerkungen:

- Durch Vergleich mit (11) erkennt man, dass $\hat{E} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ den Operator der kinetischen Energie darstellt.
- Weiters ergibt sich daraus der Impulsoperator $\hat{p}$ mit $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.

3 Die Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen in einem Potenzial

Im Folgenden wird die Schrödinger-Gleichung des vorangegangenen Abschnitts auf nicht kräftefreie Teilchen verallgemeinert (=allgemeine Form der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung). Wir betrachten dazu ein Teilchen in einem Kraftfeld, welches aus einem Potenzial $V = V(x,t)$ abgeleitet werden kann. D.h. zusätzlich zur kinetischen Energie hat das Teilchen eine potenzielle Energie. Diese wird in der Schrödinger-Gleichung wie folgt berücksichtigt

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right)}_{=\hat{H}}\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}, \tag{21}$$

wobei $\hat{H}$ den Hamilton-Operator (=Operator der Gesamtenergie) bezeichnet. Dies ist die allgemeine Form der Schrödinger-Gleichung.

4 Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Für Potenziale V, die unabhängig von der Zeit t sind, d.h. $V = V(x)$, gelangt man zur zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung. Sie beschreibt sogenannte stationäre Zustände.

Spezialfälle für zeitunabhängige Potenziale $V = V(x)$:

- Kastenpotenzial: $V = V_0$;
- Harmonischer Oszillator: $V = \frac{1}{2}Cx^2$;

Im Folgenden soll aus (21) die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung hergeleitet werden. Dazu setzen wir die Lösung der Schrödinger-Gleichung, also die Wellenfunktion $\Psi = \Psi(x,t)$, mittels eines Separationsansatzes wie folgt an

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot \varphi(t).^4 \tag{22}$$

D.h., die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ lässt sich als Produkt eines ortsabhängigen Teiles $\psi(x)$ und eines zeitabhängigen Anteils $\varphi(t)$ anschreiben. Wir bilden die Ableitungen

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \psi(x)\,\frac{\partial \varphi(t)}{\partial t}, \tag{23}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2}\,\varphi(t) \tag{24}$$

und setzen diese in (21) ein. Man erhält mit $\psi = \psi(x)$ und $\varphi = \varphi(t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\varphi + V\psi\varphi = i\hbar\psi\frac{\partial \varphi}{\partial t}. \tag{25}$$

Dividiert man den letzten Zusammenhang durch $\psi\varphi$, ergibt sich

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V = i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial t}. \tag{26}$$

Man beachte, dass die linke Seite nur mehr vom Ort x, die rechte Seite nur mehr von der Zeit t abhängt. Daraus muss folgen, dass beide Seiten konstant sind. Wir setzen die rechte Seite

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial t} = E_{ges}, \tag{27}$$

da die linke Seite von der Dimension her einer Energie entspricht. Anschließend substituieren wir dies in unsere separierte Gleichung (26) und multiplizieren mit ψ. Das Ergebnis ist die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right)\psi = E_{ges}\,\psi. \tag{28}$$

Durch Einsetzen eines konkreten Potenzials V in obiges Eigenwertproblem sowie anschließendes Lösen, erhält man die konkrete Wellenfunktion ψ.

[4] Im einfachsten Fall folgt dies unmittelbar durch $\Psi(x,t) = \Psi_0\, e^{-i(\omega t - kx)} = \Psi_0\, e^{-i\omega t}e^{ikx} = \underbrace{\Psi_0\, e^{ikx}}_{=\psi(x)}\,\underbrace{e^{-i\omega t}}_{=\varphi(t)}$.

5 Ausblick: Die 3D-Schrödinger-Gleichung...

5.1 ... in kartesischen Koordinaten

Mit $\vec{r} = \vec{r}(x, y, z)$ und $\Psi = \Psi(\vec{r}, t) = \Psi(x, y, z, t)$ wird die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (21) zu

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{29}$$

verallgemeinert, wobei $\Delta = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ den Laplace-Operator bezeichnet.

5.2 ... in Kugelkoordinaten

Will man z.B. das Wasserstoffatom oder den Atomkern modellieren, bieten sich aufgrund der Kugelsymmetrie der Potenziale

- $V(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$ (=Coulomb-Potenzial des Wasserstoffatoms)
- $V(r) = \frac{V_0}{1+e^{\frac{r-R}{a}}}$ (=Wood-Saxon-Potenzial zur Modellierung des Atomkerns mit $V_0 \ldots$ Potenzialtiefe, $R \ldots$ Kernradius, $a \ldots$ Randdickenparameter)

Kugelkoordinaten zur Beschreibung an, d.h. $\vec{r} = \vec{r}(r, \vartheta, \varphi)$. Dies verlangt jedoch eine Transformation des Laplace-Operators in Kugelkoordinaten (ohne Herleitung, siehe entsprechende math. Literatur)

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}. \tag{30}$$

Dieser ist für die beiden obigen Fälle in die auf drei Dimensionen verallgemeinerte zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (28) einzusetzen.