• Wie alle Grundgleichungen der Physik (z.B. Newton'sche Gesetze, Maxwell-Gln.) ist die Schrödinger-Gleichung (im Folgenden: SG) ein Axiom, das nicht hergeleitet werden kann (außer im Nachhinein aus einer allgemeineren Theorie, die dann ihrerseits postuliert werden muss*), sondern sich durch Vergleich seiner Vorhersagen mit dem Experiment bewähren muss. Man kann die SG aber auf verschiedene Weisen <u>motivieren</u>, von denen wir eine Variante diskutieren wollen:

Betrachte eine ebene Welle $\Psi(\vec{x},t) = A\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}$
und die Einstein-Beziehung $E = \hbar\omega$

spez. Relativitätstheorie:

$$\begin{pmatrix} ct \\ \vec{x} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} E \\ \vec{p}c \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \omega \\ \vec{k}c \end{pmatrix}$$ bilden Vierervektoren

2) Es sollte auch gelten: $\boxed{\vec{p} = \hbar\vec{k}}$

(de Broglie 1924)

⇒ „de Broglie-Wellenlänge":

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}$$

---

* Umgekehrt sollte sich die „alte" Theorie als ein bestimmter Grenzfall der „neuen" Theorie ergeben, also z.B. die QM als Grenzfall der klass. Mechanik („Korrespondenzprinzip")

Wie kann man E und $\vec{p}$ aus der ebenen Welle „extrahieren"?

→ <u>Differenzialoperatoren</u>

$$\boxed{\begin{aligned} E &\to \hat{E} := i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} &\to \hat{\vec{p}} := \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \end{aligned}}$$

$$\Rightarrow \hat{E} \Psi = \hbar \omega \Psi = E \Psi$$

$$\Rightarrow \hat{\vec{p}} \Psi = \hbar \vec{k} \Psi = \vec{p} \Psi$$

Annahme: Diese Zuordnung gilt allgemein.

(nicht-rel.) Energie-Impuls-Beziehung

$$E = T + V = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V$$

also:

$$\hat{E} \Psi = \left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{V} \right) \Psi$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + \hat{V} \right) \Psi$$

Dabei gilt für rein ortsabhängige Potenziale einfach $\hat{V} = V(\vec{x})$.

- Für vorgegebene Anfangsbedingung $\Psi(\vec{x}, t_0)$ ist die zeitliche Entwicklung der Wellenfkt. durch die SG eindeutig festgelegt.

<u>aber</u>: $\Psi(\vec{x}, t)$ ist nicht messbar! (Wahrscheinlichkeitsamplitude!)

Beachte: Ψ ist komplexwertig

$$\Psi(\vec{x}, t) = |\Psi(\vec{x}, t)| \, e^{i\varphi(\vec{x}, t)}$$

← für die Messung irrelevante Phase

↑ Wurzel der Wahrsch.dichte

- <u>Normierung:</u>

Die SG erlaubt die Multiplikation von ψ mit einem konstanten Faktor

Forderung: $\int d^3x\ \rho(\vec{x},t) = \int d^3x\ |\psi(\vec{x},t)|^2 \stackrel{!}{=} 1$

$\Rightarrow$ Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Raum zu finden ist gleich eins.

$\rightarrow$ Zusatzbedingung an die Lösungen der SG:

$\psi(\vec{x},t)$ muss <u>quadrat-integrabel</u> sein,
d.h. für die unnormierte Lösung muss gelten $\int d^3x\ |\psi(\vec{x},t)| = c \neq 0, \infty$.

$\Rightarrow$ $\psi(\vec{x},t)$ muss für $|\vec{x}| \to \infty$ schnell genug abfallen.

- <u>Wahrscheinlichkeitserhaltung</u> (Teilchenzahlerhaltung)

Der multiplikative Faktor zur Normierung darf nicht von der Zeit abhängen.
Wenn wir die Wellenfkt. zur Zeit $t = t_0$ auf 1 normieren, bleibt die Normierung dann erhalten?

komplex konjugierte SG:

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

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$= \left[\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi^*\right]\psi + \psi^*\left[-\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi\right]$$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\left[(\Delta\psi^*)\psi - \psi^*(\Delta\psi)\right]$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot\Big[\underbrace{\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^{*}\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^{*}\right)}_{=:\ \vec{j}(\vec{x},t)}\Big]$$

„Wahrscheinlichkeitsstromdichte"

2) <u>Kontinuitätsgleichung:</u>

$$\boxed{\frac{\partial \rho(\vec{x},t)}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{x},t) = 0}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\int_V d^3x\, \rho(\vec{x},t) = \int_V d^3x\, \frac{\partial \rho(\vec{x},t)}{\partial t} = -\int_V d^3x\, \vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{x},t)$$

$$\overset{\text{Gauß}}{=} -\int_{\partial V} d\vec{S}\cdot\vec{j}(\vec{x},t)$$

zeitl. Änderung der Wahrsch., das Teilchen in V zu finden

„Wahrscheinlichkeitsfluss" durch die Oberfläche von V

V = gesamter Raum:

$$\frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x\, \rho(\vec{x},t) = 0$$

, da ψ und damit $\vec{j}$ für $|\vec{x}|\to\infty$ verschwinden.

- <u>Messprozess:</u>

Durch eine Messung ändert sich ψ schlagartig: Man weiß ja nun das Messergebnis zu diesem Zeitpunkt mit Sicherheit (z.B. Aufenthaltsort im Rahmen der Messgenauigkeit)

→ Die SG beschreibt nur die zeitliche Entwicklung von ψ, solange <u>nicht</u> gemessen wird (vgl. Doppelspalt-Experiment).

mehr dazu später ...