

Die zeitabhängige Schrödingergleichung

Advanced

Die allgemeinste Form der Schrödingergleichung enthält die Zeit als Variable. Sie lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z, t)}{\partial z^2} \right) + V_{\text{pot}}(x, y, z, t) \cdot \psi = i \cdot \hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}$$

- Dabei ist $V_{\text{pot}}(x, y, z, t)$ die **potentielle Energie** des betrachteten Systems. In ihr, zusammen mit den Rand- und Anfangsbedingungen des jeweiligen Problems, steckt die gesamte Information über das betrachtete System.
- Man beachte, daß die Gleichung die imaginäre Einheit i als integralen Bestandteil enthält! Ein ziemlich radikaler Schritt bei der Beschreibung physikalischer Realität.
- Diese zeitabhängige Schrödingergleichung ist eine der Fundamentalgleichungen der Physik. Sie enthält als "Näherung" die gesamte klassische Mechanik (und damit auch die Thermodynamik).
- Sie ist allerdings nicht verträglich mit der speziellen Relativitätstheorie. Das ist sie erst in einer noch mehr verallgemeinerten Form; sie heißt dann **Dirac-Gleichung**.
- Auch die **Maxwell-Gleichungen** finden sich in dem generellen Konzept der (verallgemeinerten) Schrödingergleichung wieder; letztlich ist sie eine der beiden Säulen der gesamten Physik. Die andere Säule ist die allgemeine Relativitätstheorie - und diese beiden Säulen sind zur Zeit **völlig unvereinbar!**
- Man kann die Schrödingergleichung vereinfacht wie folgt darstellen:

$$\mathbf{H}\psi = i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}$$

- Dabei ist \mathbf{H} ein sogenannter **Operator**, der auf die rechts von ihm stehende Funktion angewendet wird. \mathbf{H} ist offenbar wie folgt definiert:

$$\mathbf{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{pot}}$$

- Δ ist der Laplace-Operator, und "Anwendung des Operators" heißt, genau das zu tun, was in der ausführlichen Gleichung gezeigt ist.
- Der Operator \mathbf{H} ist die zentrale Größe der ganzen Quantentheorie. Er hat deshalb einen Namen und heißt **Hamilton-Operator**.
- Seine Anwendung auf die Wellenfunktion des betrachteten Systems liefert die Gesamtenergie E und die Wellenfunktionen des Systems. Da der Energieerhaltungssatz auch in der Quantentheorie gilt (zumindest im zeitlichen Mittel), ist E eine Konstante des Systems, falls sich zeitlich nichts mehr ändert, d.h. das System auch keine Energie mit der Außenwelt austauscht.
- Dies bedingt, daß die potentielle Energie V_{pot} nicht von der Zeit abhängt, und für diesen Fall kann man die zeitabhängige Schrödingergleichung sofort vereinfachen. Dazu machen wir **einfach** (weil wir es schon wissen) den Lösungsansatz:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi'(x, y, z) \cdot \exp - (i \cdot \omega \cdot t)$$

$$E = \hbar \cdot \omega$$

$$\omega = \text{Kreisfrequenz der Materiewelle}$$

Einsetzen liefert sofort

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{pot}}(x, y, z) \right) \psi'(x, y, z) \cdot \exp - (i \cdot \omega \cdot t) = i \cdot \hbar \cdot (-i \cdot \omega) \cdot \psi'(x, y, z) \cdot \exp - (i \cdot \omega \cdot t)$$
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{pot}}(x, y, z) \right) \psi'(x, y, z) = \hbar \cdot \omega \cdot \psi'(x, y, z)$$
$$= E \cdot \psi'(x, y, z)$$

Das Endresultat ist natürlich die zeit~~un~~abhängige Schrödingergleichung, wie wir sie [bereits kennen](#).

Das einzige "Problem" ist die Gleichsetzung von $\hbar \cdot \omega$ mit der Gesamtenergie E . Wie kommen wir auf diese Beziehung?

- Klar ist zwar, daß $\hbar \cdot \omega$ eine Energie sein muß, aber warum gerade die Gesamtenergie?
- Um es kurz zu machen: Es ist einfach ein grundlegendes Postulat – so wie die Schrödingergleichung selbst. Man kann zwar alle Arten von Analogieschlüssen, Beziehungen zu anderen Gleichungen etc. bemühen, aber letztlich muß es so sein, weil sonst das gesamte Gebäude der Quantentheorie nicht konsistent wäre.