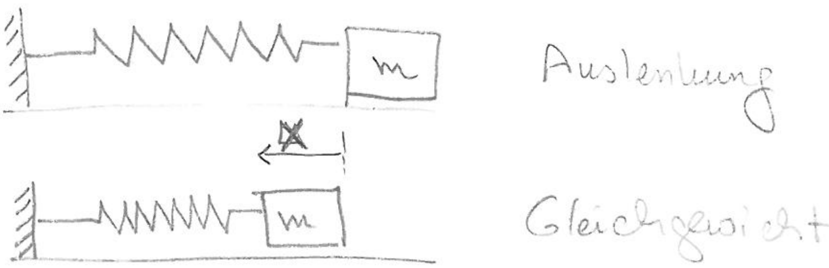
Die Schrödinger Gleichung: Eine Einführung in die Quantenmechanik (1926)

Beim Bohr'schen Atommodell stellt sich die Frage, wo das Elektron ist und ob es eine Welle oder ein Teilchen ist.

Ansatz: Teilchen als Welle über den Raum verteilt. Es gibt Ort, wo es wahrscheinlicher ist es zu treffen bzw. wo es unwahrscheinlicher ist.

→ Funktion nötig zur Beschreibung $y = f(t)$

Bsp.: Federpendel



Annahme Reibungsfreie Schwingung der Masse m

$F_r = -D \cdot x$ (rücktreibende Kraft) D: Federkonstante (Hooke'sches Gesetz)

$F_a = m \cdot a = m \cdot \frac{d^2x}{dt^2}$

→ im GGW $F_r = F_a$

$-D \cdot x = m \cdot \frac{d^2x}{dt^2} \longrightarrow 0 = m \cdot \frac{d^2x}{dt^2} + Dx$

$\longrightarrow 0 = \frac{d^2x}{dt^2} + \underbrace{\frac{D}{m}}_{\omega^2} \cdot x$

$\omega = \sqrt{\frac{D}{m}}$ Eigenfrequenz (Frequenz der Schwingung nach einmaliger Anregung)

Lösung: $x = K \cdot e^{\alpha t}$

$\frac{dx}{dt} = \alpha K e^{\alpha t} = \alpha x$ $\qquad \frac{d^2x}{dt^2} = \alpha^2 K e^{\alpha t} = \alpha^2 x$

$$\rightarrow \alpha^2 x + \omega^2 x = 0$$
$$\alpha^2 = -\omega^2$$
$$\alpha = \pm\sqrt{-1}\cdot\omega$$
$$= \pm i\omega$$

$\sqrt{-1} = i$ Imaginäre Zahl

2 Teillösungen

$$\Psi_1 = K_1 e^{i\omega t}$$
$$\Psi_2 = K_2 e^{-i\omega t}$$

Eulerschen Gleichungen:

$$e^{i\omega t} = \cos(\omega t) + i\sin(\omega t)$$
$$e^{-i\omega t} = \cos(\omega t) - i\sin(\omega t)$$

$\Rightarrow$

$$\Psi_1 = K_1 e^{i\omega t} = K_1(\cos(\omega t) + i\sin(\omega t))$$
$$\Psi_2 = K_2 e^{-i\omega t} = K_2(\cos(\omega t) - i\sin(\omega t))$$

Vollständige Lösung:

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

Physikalisches Problem $\Rightarrow$ reelle Lösung

falls $K_1 = K_2 = 1/2 \Rightarrow \Psi(x) = \cos(\omega t)$

$K_1 = \frac{1}{2}i$ u. $K_2 = -\frac{1}{2}i \Rightarrow \Psi(x) = \sin(\omega t)$

Vollständige reelle Lösung durch Linearkombination

$$\Psi = A\sin(\omega t) + B\cos(\omega t)$$

$\rightarrow$ Gleichung für periodische Bewegung $\hat{=}$ ungedämpfte Schwingung mit Eigenfrequenz $\nu_0 = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{\tau}$

$$\Rightarrow \omega = \frac{2\pi}{\tau}$$

τ: Schwingungsdauer

A, B durch Anfangsbedingungen definiert

Beschreibung vom Bild: Auslenkung der Masse m um x

$\Rightarrow \quad x(t=0) = x_0$

Geschwindigkeit $t=0 \quad v(t=0)=0$

$$x(t=0) = x_0 = A \underbrace{\sin(\omega t)}_{0} + B \underbrace{\cos(\omega t)}_{1} = B \Rightarrow \underline{\underline{B = x_0}}$$

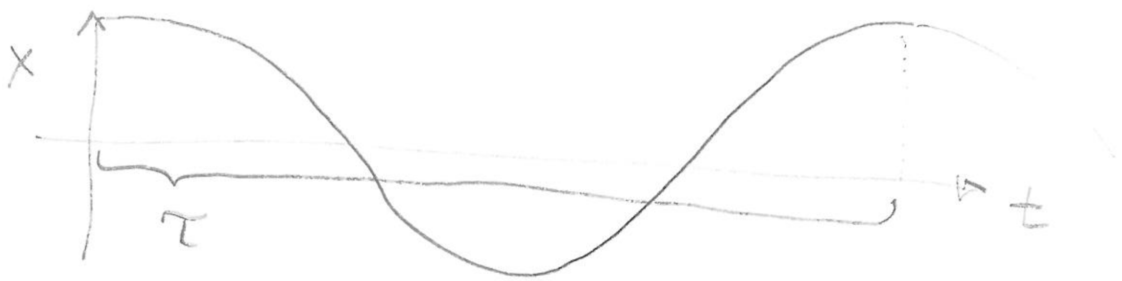
Geschwindigkeit

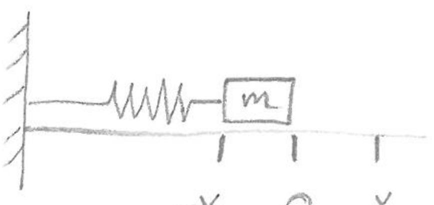
$$v = \frac{dx}{dt} = \omega A \cos(\omega t) - \omega B \sin(\omega t)$$

$$\frac{dx}{dt}(t=0) = \omega A \underbrace{\cos(\omega t)}_{1} - \omega B \underbrace{\sin(\omega t)}_{0}$$

$$0 = \omega A \longrightarrow A = 0$$

$$\Longrightarrow x = x_0 \cos(\omega t) = x_0 \cos\left(\frac{2\pi}{T} t\right)$$





Masse schwingt periodisch mit Amplitude x_0 und der Frequenz $\nu_0 = \frac{1}{T} = \frac{\omega}{2\pi}$ und die GGW-Lage

Ähnliche Wellenfkt. beschreibt Teilchen im Raum?

Allgemeines über Wellenfunktionen Ψ:

- Meistens einfache Funktionen, wie $\sin x$ oder e^x
- Beschreibt alle zugänglichen Parameter bzgl. Ort und Bewegung eines Teilchen
- Nimmt die Wellenfunktion (im Betrag) einen großen Wert an, so ist dort die Wahrscheinlichkeit groß das Teilchen anzutreffen
- Je stärker sich die Funktion von Ort zu Ort ändert, umso größer ist die kinetische Energie des Teilchen

Schrödinger Gleichung (1926):

ermöglicht die Berechnung des Wellenfunktion von beliebigen Systemen von Teilchen

Eindimensionale Schrödinger Gleichung

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi}_{\text{"Kinetische Energie"}} + \underbrace{V(x)\cdot\Psi}_{\text{"Potentielle Energie"}} = E\cdot\Psi \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

[illegible] Konstante

Teilchen der Masse m bewegt sich in einer Dimension

Betrachtung der Gleichung:

Annahme $E_{pot} = 0$ $V(x) = 0$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi = E\Psi$$

Mögliche Lösung $\Psi = e^{ikx} = \cos(kx) + i\sin(kx)$ mit $\underbrace{k = \frac{2\pi}{\lambda}}_{\text{Wellenzahl}}$

$$\frac{d}{dx}\Psi = ik\,e^{ikx} = ik\Psi$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi = i^2k^2e^{ikx} = i^2k^2\Psi = -k^2\Psi$$

→ Einsetzen in Schrödinger Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(-k^2 \Psi\right) = E \Psi$$

$$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

da $V(x) = 0$, gilt: $E = E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$

gleichsetzen

$$\frac{\hbar^2 k^2}{\cancel{2m}} = \frac{p^2}{\cancel{2m}} \Rightarrow p = \hbar k$$

$$= \frac{h}{\cancel{2\pi}} \cdot \frac{\cancel{2\pi}}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} \rightarrow \text{de Broglie}$$

⇒ frei bewegliche Teilchen bestätigen die Gleichung experimentell

Außerdem: $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E_{kin}} = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{h} \cdot p = \frac{p}{\hbar}$

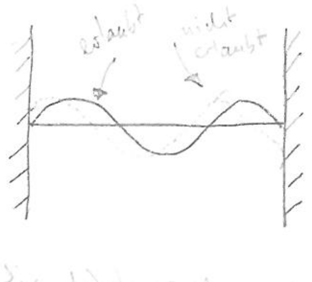
$$p = \sqrt{\frac{2m\hbar^2}{\hbar^2} E_{kin}} = \sqrt{2m E_{kin}}$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

Aber Schrödinger Gleichung unendlich viele Lösungen
(sin x und a sin x sind z.B. Lösungen)

Aber nur die Lösungen sinnvoll, die die Randbedingungen erfüllen

Bsp: Teilchen im Kasten mit 2 undurchdringlichen Wänden



Physikalisch sinnvoll sind nur Lösungen deren Wellenfunktion genau zwischen die Wände passt

Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen in der Wand zu finden ist null!

Da zu jeder Wellenfunktion ein konkreter Energiewert gehört und die Randbedingungen nur viele Lösungen verbieten, folgt direkt die Quantelung und diskrete Energieniveaus

Bornsche Interpretation der Wellenfunktion

Max Born: Die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen in einem infinitisimalen Volumenelement δV zu finden beträgt $\Psi^2 \delta V$. Ψ ist die Wellenfunktion in diesem Bereich

$$\text{Wahrscheinlichkeit} = \int_V \underbrace{\Psi^* \Psi}_{\substack{\text{konjugiert} \\ \text{komplex}}} dV = \Psi^2 \int_V dV = \Psi^2 \cdot V$$

z.B. $\Psi = a + ib$ → Mathematiker anbieten [illegible]

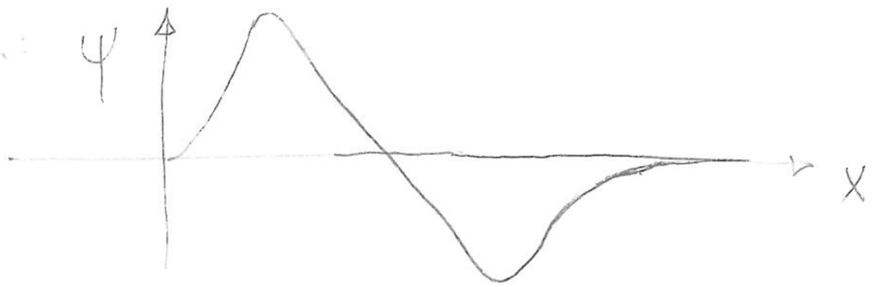
$\Psi^* = a - ib$

Volumenelement muss konstant sein

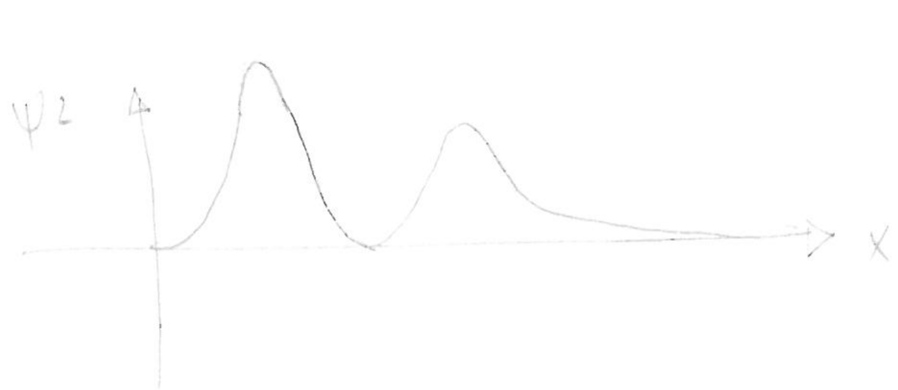
Ψ^2 wird daher auch Wahrscheinlichkeitsdichte genannt

An Orten mit großen Ψ^2 ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens groß. Ist Ψ^2 klein, so ist die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zu treffen klein

z.B.:



Wellenfunktion hat keine phys. Bedeutung



Wahrscheinlichkeit das Teilchen am Ort x zu treffen

Draufsicht: Schattierung stellt Wahrscheinlichkeit dar

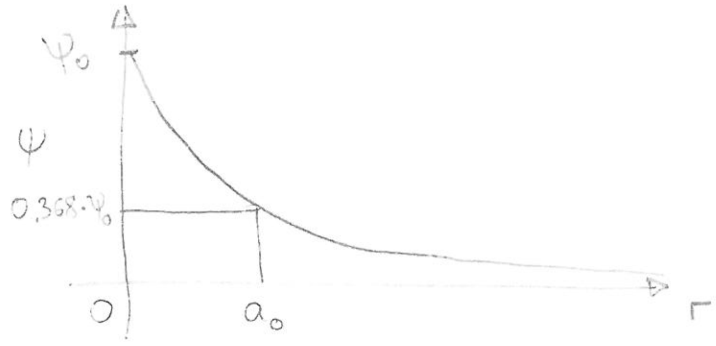
Bsp.: Atom: Wellenfunktion eines Elektrons im Grundzustand

$\Psi \sim \Psi_0 \, e^{-r/a_0}$ mit r: Abstand Elektron - Kern

a_0: 52.9 pm (Bohrscher Radius)

Gesucht: Wahrscheinlichkeit für e^- a) im Kern

b) im Abstand a_0



a) Wahrscheinlichkeit $\sim \Psi^2 \delta V$

$$= e^{-\frac{2 \cdot 0}{a_0}} \delta V$$

$$= 1 \, \delta V$$

b) Wahrscheinlichkeit $\sim \Psi^2 \delta V$

$$= e^{-\frac{2 a_0}{a_0}} \delta V$$

$$= e^{-2} \delta V$$

$$= 0.14 \, \delta V$$

→ Verhältnis $\frac{1}{0.14} = 7.1$

→ Es ist also 7.1 mal wahrscheinlicher das Elektron am Kern zu finden als im gleich großen Volumenelement δV im Abstand a_0

Problem: Wie genau lassen sich z.B. Ort und Geschwindigkeit bestimmen?

Die Heisenbergsche Unschärferelation:

de Broglie: $p = \frac{h}{\lambda}$ → Welle mit konstanter Wellenlänge entspricht einem Teilchen mit konstantem Impuls

(gebürtiger Franzose, aber flämischer Name)

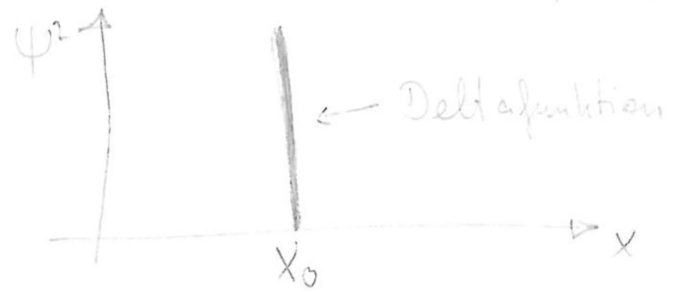
⟹ Welle nicht an einem Ort lokalisiert

→ genauer Ort nicht bestimmbar

Es ist unmöglich, gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit sowohl den Impuls als auch den Ort eines Teilchens anzugeben.

Genauer Ort des Teilchens:

Wellenfunktion $\psi \neq 0$ am Ort des Teilchens x_0, an allen anderen Orten $\psi = 0$ (Deltafunktion, ergibt sich aus Σ von unendlich vielen e-Fkt mit versch. λ)



Solche Wellenfunktionen können nur durch Überlagerung vieler Wellenfunktionen erreicht werden, die alle einen anderen Impuls haben.

$$\Longrightarrow \Delta p \, \Delta x \geq \frac{1}{2}\hbar$$

$$\Delta p = \left(\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2\right)^{1/2}$$

$$\Delta x = \left(\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2\right)^{1/2}$$

Orts- bzw. Impulsunschärfe

⟹ Ist z.B. der Ort genau bestimmt, so geht jede Information über den Impuls verloren!

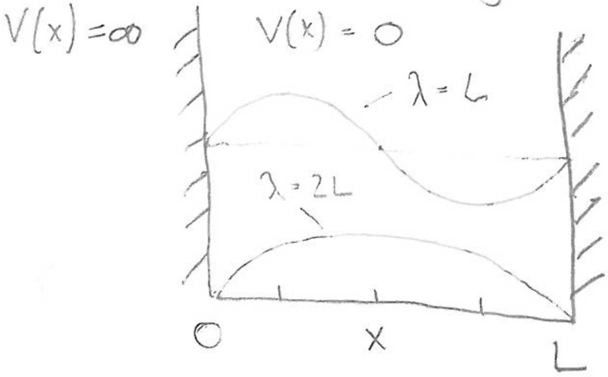
Weitere Unschärfepaare:

- ΔE und Δt
- Winkel und Drehimpuls
- zwei beliebige Spinkomponenten

→ Moleküle können in den Freiheitsgraden Rotation, Translation und Schwingung speichern, diese Energie ist für die Eigenschaften der Moleküle von grundlegender Bedeutung!

Translation: Teilchen im Kasten

freie Bewegung: $V(x) = 0$ im Kasten von $x = 0$ bis $x = L$



$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

(Gleichung im Kasten)

allgemeine Lösung

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

- Anwesenheit der Wände führt dazu, dass nur Lösungen möglich sind, deren Wellenlänge zwischen die Wände passt.
- Wellenfkt muss stetig sein und außerhalb des Kastens verschwinden

$\rightarrow \psi(x=0) = 0 \qquad \psi(x=L) = 0$

Lösungen, die den Randbedingungen gehorchen:

$\psi = N \cdot \sin kx \qquad$ mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

$\psi = N \sin \frac{2\pi}{\lambda} x$

Welche Wellenlängen sind erlaubt?

$\lambda = 2L, L, \frac{3}{2}L, \ldots$

$\lambda = \frac{2L}{n}$ mit $n \in \mathbb{N}$

$\Rightarrow$ erlaubte Wellenfkt:

$$\psi = N \sin\left(\frac{n\, 2\pi}{2L} x\right) = N \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$