<u>Schrödingergleichung</u>

<u>Schrödinger</u>
Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger wurde am 12. August 1887 in Wien-Erdberg als Sohn des Wachstuchfabrikanten und Botanikers Rudolf Schrödinger und dessen Frau Georgine Emilia Brenda geboren.

Seine Mutter war die Tochter des Professors für Allgemeine Chemie Alexander Bauer an der k. k. Technischen Hochschule zu Wien. Erwin Schrödinger besuchte ab 1898 das Akademische Gymnasium. In Anschluss studierte er von 1906 bis 1910 in Wien Mathematik und Physik und habilitierte am Wiener Physikalischen Institut. Hier arbeitete er unter anderem mit Franz Exner, Friedrich Hasenöhrl und K. W. F. Kohlrausch zusammen. Nach seiner Kriegsteilnahme als Soldat des Ersten Weltkriegs, folgte er der Berufungen nach Jena, Stuttgart, Breslau und Zürich. Er belegte als Professor den Lehrstuhl für Theoretische Physik, den vor ihm bereits Albert Einstein und Max von Laue innehatten.

Indes heiratete er am 6. April 1920 Annemarie Bertel. Schödinger formulierte 1926 die nach ihm benannte "Schrödinger-Gleichung". Damit begründete Schödinger die Wellenmechanik als Beschreibung der Quantenmechanik. Sie bildet eine der axiomatischen Grundlagen der Quantenmechanik und beschreibt die zeitliche Entwicklung quantenmechanischer Systeme. 1927 reiste Schrödinger nach Berlin, wo er die Nachfolge von Max Planck an der Humboldt-Universität antrat. Zahlreiche Physiker von Weltrang versammelten sich in jenen Jahren an der Berliner Universität. Hier arbeitete er auch mit Victor Weisskopf zusammen. Nach der Machtergreifung der NSDAP 1933 entschloss er sich Deutschland zu verlassen und eine Stelle am Magdalen College in Oxford, England anzunehmen.

Im selben Jahr, 1933, wurde Erwin Schödiger der Nobelpreis für Physik verliehen. 1936 kehrte er noch einmal nach Österreich zurück, um an der Grazer Karl-Franzens-Universität einen Lehrstuhl aufzunehmen. 1937 wurde ihm die Max-Planck-Medaille verliehen. 1938 reiste nach Dublin, wo er bis 1940 unterrichtete und Direktor der School for Theoretical Physics wurde. In Schödingers 1944 erschienenen Abhandlung "Was ist Leben?" (What is Life?) führt er den Begriff der "Negentropie" ein und trägt nachhaltig zur Entwicklung der Molekularbiologie bei, indem er biologische Themen physikalisch erklärte. 1956 kehrte er erneut nach Wien zurück, um am Institut für Theoretische Physik der Universität Wien zu Lehren.

Schrödingers bekanntestes Gedankenexperiment ist "Katze", womit er die kontraintuitiven Auswirkungen der Quantenmechanik erstmals auf Gegenstände des täglichen Lebens übertrug. Weiter veröffentlichte der Physiker fünfzig Publikationen und führte Versuche zur einheitlichen Feldtheorie durch.

Erwin Schrödinger starb am 4. Januar 1961 in Wien.

Bedeutung

Die Schrödingergleichung hat eine nicht so offensichtliche Bedeutung. Als Lösung für die Differentialgleichung bekommt man die Wellenfunktion. Der Ansatz dazu kommt von der Materiewelle De-Broglies der behauptete dass alle Teilchen auch als Welle beschrieben werden können. Diese ist als Lösung für Schrödingers Postulat anzusehen.

Der Begriff Wahrscheinlichkeitsamplitude wird auch oft in Zusammenhang mit der Schrödingergleichung verwendet. Damit beschreibt man die Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Elektronen bei der Bildung von Interferenzmustern bei Doppelspalt-Experimenten. Aufenthaltswahrscheinlichkeit spielt hier eine große Rolle, da diese eine Sache ist die man mit der Schrödingergleichung erklären kann. Ein weiterer wichtiger Begriff ist die Zustandsfunktion eines Quantenobjekts, ein weiteres Synonym für die Wellenfunktion Psi Ψ.

Als Aufenthaltswahrscheinlichkeit definiert man den absoluten Betrag von Ψ, also $|\Psi|^2$. Diese Interpretation kommt von Max Born der so versuchte ungefähre Angaben von dem Aufenthalt eines Teilchens an einem Ort x zu einer Zeit t anzugeben.

Dabei darf man die Wellenfunktion nicht als wirkliche Welle aus der Klassischen Physik vorstellen, der Name kommt lediglich durch formale Ähnlichkeiten mit der Funktion der mechanischen Welle zustande. Die Lösung der Schrödingergleichung ist auch keine Wellenfunktion im Sinne der Schwingungslehre, aber man kann es als quantenmechanischem Analogon dazu sehen. Wenn man da tiefer geht dann stößt man auf viele umstrittene Meinung, oft sind etablierte Physiker nicht sicher ob die Wellenfunktion tatsächlich realistisch gedeutet werden kann und ob man damit wirklich den Zustand eines Quants darstellen kann.

Hierbei spielen die verschiedenen Interpretationen eine Rolle, die momentan relevante ist die Kopenhagener-Deutung, wobei die Physiker sich hier auch nicht einig sind.

Herleitung der Schrödingergleichung ohne Potential

Eine physikalische Herleitung im herkömmlichen Sinne gibt es nicht, denn diese Gleichung ist nur ein Postulat, also als der liebe Schrödinger sie aufgestellt hat ist er einfach davon ausgegangen dass sie richtig ist. Wie er auf sie gekommen ist weiß man nicht, es ist anscheinend erraten gewesen. Ähnlich wie bei den elementaren Gleichung Newtons in der klassischen Physik, kann man die Schrödingergleichung aus nichts herleiten, weil sie der Grundsatz der Quantenphysik ist. Allerdings kann man sie mathematisch gesehen plausibel machen und analysieren, was das Verständnis erleichtern sollte.

Anfangen werde ich mit der nicht-relativistischen Schrödingergleichung, auch wenn diese nur für kleine Geschwindigkeiten gilt.

Wenn ein Teilchen mit der Masse m sich vollkommen ohne Einfluss mit der Geschwindigkeit v durch den Raum bewegt, ist die Gesamtenergie gleich der Kinetischen Energie, weil keine äußeren Einflüsse Potentielle Energie erzeugen. Dadurch bekommt man die Formel:

$$E_{kin}=\frac{1}{2}*mv^2$$

Dadurch das

$$p^2=m^2*v^2$$

entspricht, kann man das ganze in der Form anschreiben:

$$E_{ges}=\frac{1}{2}*mv^2=\frac{1}{2}\frac{p^2}{m}$$

Der Impuls eines Quantenobjekts ist durch den Ausdruck p = h/λ definiert. Das bekommt man aus der Gleichung für die De-Broglie-Wellenlänge. Die Wellenzahl eines Quantenobjekts, also k, kann man genauso durch die Wellenlänge ausdrücken.

$$k=\frac{2*\pi}{\lambda} \quad \rightarrow \quad p=\frac{kh}{(2*\pi)}=k\hbar \quad \rightarrow \quad E_{ges}=\frac{k^2*\hbar^2}{2\mathrm{m}}=\hbar\,\omega$$

Jetzt wird es ein wenig heikler, weil die Herleitung zwar mathematisch nachvollziehbar ist, allerdings sehr kreativ und willkürlich wirkt. Man nehme an dass die Wellenfunktion Ψ (x; t), welche auch als De-Broglie-Welle bezeichnet wird, gegeben ist. Um es mal ein wenig einfacher zu machen gehen wir davon aus der keine Äußeren Kräfte einwirken, also dass das Potential gleich Null ist. Dann hat die Wellengleichung die Form:

$$\psi(x;t)=e^{(i(kx-\omega t))}$$

Nun wird zuerst partiel nach t abgeleitet, und dann noch 2 mal partiel nach x.

$$\frac{\delta\psi(x;t)}{\delta t}=i\,\omega*e^{i(kx-\omega t)} \quad \rightarrow \quad \frac{\delta^2\psi(x;t)}{\delta^2 x}=i^2k^2*e^{i(kx-\omega t)}$$

Nun wird die Gleichung für die Gesamtenergie, die wir über die Wellenzahl und den Impuls erhalten haben mit dem Term $-i^2 e^{i(kx-\omega t)}$ multipliziert. Dadurch erhält man:

$$-i^2*\hbar\,\omega*e^{i(kx-\omega t)}=-i^2\frac{k^2h^2}{2\mathrm{m}}*e^{i(kx-\omega t)}$$

Das Überraschende hierbei ist dass man durch Umformen von Termteilen hier, die partiellen Ableitungen von oben wiederfinden können.

$$-i^2 * \hbar \omega * e^{i(kx-\omega t)} = -i^2 \frac{k^2 h^2}{2\mathrm{m}} * e^{i(kx-\omega t)} \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}} i^2 k^2 * e^{i(kx-\omega t)} = i \hbar (-i) \omega * e^{i(kx-\omega t)}$$

$$\rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}} \frac{\delta \psi(x;t)}{\delta x^2} = i \hbar \frac{\delta \psi(x;t)}{\delta t}$$

Und genau das ist die besagte Schrödingergleichung ohne den Einfluss äußerer Kräfte. Durch diese mathematischen Vorgänge lässt sich die Schrödingergleichung nachvollziehen, allerdings sind viele davon ziemlich willkürlich und auch erst verständlich wenn man die Gleichung die man „herleiten“ will schon hat.

Verallgemeinerung der Schrödingergleichung

Die oben formulierte Form der Schrödingergleichung gilt nur in sehr speziellen Fällen, die in dieser Form praktisch nie auftreten, weil es im ganzen Universum keinen Ort gibt bei dem man komplett ohne Potential ist, weil die Gravitation, zum Beispiel, unendlich weit wirkt. Deswegen musste man eine allgemein-gültige Form finden, eine Form die auch für V(x; t) ≠ 0 gilt. Hier ging Schrödinger so vor, dass er die Gleichung für die Gesamtenergie eines Quantenobjekts einfach mit dem Potential addierte, er machte also aus $E_{ges} = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m}$ einfach ein $E_{ges} = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} + V(x;t)$. Er fügt der Kinetischen Energie noch eine Potentielle hinzu. Deswegen schlug Schrödinger als Verallgemeinerte Form diese Gleichung vor:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}} \frac{\delta \psi(x;t)}{\delta x^2} + V(x;t) \psi(x;t) = i \hbar \frac{\delta \psi(x;t)}{\delta t}$$

Allerdings ist diese Gleichung nur in eindimensionalem Zustand gütlig, und damit man diese auch für dreidimensionale Fälle nützen könnte, also wenn sich der Quant auch in y oder in z Richtung bewegt, hat man aus dem x ein r gemacht, welches für x, y und z steht. Nun muss man aber auch in alle drei Richtung 2 mal Ableiten um die Gleichung richtig zu stellen, und dieser Vorgang entspricht dem Laplace-Operator

$$\Delta^2 = \frac{\delta^2}{\delta x^2} + \frac{\delta^2}{\delta y^2} + \frac{\delta^2}{\delta z^2} \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}} \Delta^2 \psi(r;t) + V(r;t) \psi(r;t) = i \hbar \frac{\delta \psi(r;t)}{\delta t}$$

Da der Vorgang $i \hbar \frac{\delta}{\delta t}$, also der für die Entwicklung mit der Zeit zuständige Term der Schrödingergleichung, in der Quantenphysik häufiger vorkommt hat man ihm die Bezeichnung Hamilton-Operator gegeben. Dieser Operator stellt eben einen speziellen mathematischen Rechenvorgang da, der in der Quantenmechanik eine zentrale Rolle spielt angeschrieben wird dieser mit $\hat{H}$. Da der erste Teil der Schrödingergleichung den Energiezustand beschreibt kann man

deswegen die Schrödignergleichung in sehr einfacher Form darstellen.

$$E\,\psi = \hat{H}\,\psi$$

Man muss hierbei beachten dass diese Gleichung aus einem unfassbarem Ratevorgang heraus entstanden ist. Diese stationäre Form der Schrödingergleichung, also die zeitunabhängige Form schaut so aus:

$$\frac{-\hbar}{2\mathrm{m}}\frac{\delta^2\psi}{\delta x^2}+V(x;t)\,\psi=E_{ges}\,\psi$$

Beispiel Wasserstoffatom

Ein Wasserstoffatom besteht aus einem Proton um welches unter Einfluss der Coulombkraft ein Elektron kreist. Die Energie des Elektrons ist abhängig von dem Energieniveau auf dem es sich befindet. Dabei gilt

$$E_n=\frac{-\frac{e^4 m_e}{8\epsilon_0^2 h^2}}{\frac{1}{n^2}}$$

Da für die Variable n nur diskrete Werte genommen werden können kann das Elektron nicht jede beliebige Energie haben, dadurch kommen auch die einzelnen Energieniveaus zustande. Im Normalfall wird n = 1 gelten, das heißt das Wasserstoffatom ist nicht angeregt, also im Grundzustand. Quantenmechanisch kann man ja nicht von einer Kreisbahn sprechen, weil dies der Heisenberg'schen Unschärferelation widersprechen würde, also würde man für E_n im Falle n = 1den Radius der Kugelschale, in der sich das Elektron am Wahrscheinlichsten aufhält, bekommen.

Hier steht e für die Elementarladung eines Elektrons, die entspricht 1,6 x 10 -19 C, und me ist die Masse des Elektrons, welches circa 9,1 x 10 -31 kg entspricht. Die Elektrische Feldkonstante ist hier mit ε beschrieben und hat den circa den Wert 8,9 x 10 -12. Die Konstante h ist das Planck'sche Wirkungsquantum mit einem Wert von ungefähr 6,6 x 10-34. Setzt man diese Werte für n=1 ein bekommt man die Energie eines Elektrons,