Die Schrödinger Gleichung

©Markus Baur

December 15, 2010

Im Jahr 1926 entwarf der Physiker Erwin Schrödinger die wichtigste Gleichung der Quantenmechanik, aus der sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens im Raum ausrechnen läßt. Diese Gleichung kann man niucht aus übergeordneten physikalischen Regeln ableiten. Mit dieser Gleichung ist man aber in der Lage, in einem Atom die Energiezustände zu bestimmen. Bei der Schrödinger- Gleichung handelt es sich um eine Differentialgleichung zweiter Ordnung.

Zeitunabhängige Schrödinger

Ist $\Psi(x)$ die Wellenfunktion eines Teilchens, dann gilt der folgende Zusammenhang:

$$\Psi''(x) + \frac{8\pi^2 \cdot m}{h^2}(E - E_{\mathrm{pot}})\Psi(x) = 0$$

Diese Gleichung wird nun auf einen eindemensionalen unendlichen Potentialtopf angewendet.

- Man betrachtet ein Elektron in einem Atom der Breite a als eingeschlossen.

Unendlicher Potentialtopf

- Man betrachtet ein Elektron in einem Atom der Breite a als eingeschlossen.
- Die Gesamtkraft auf ein Elektron innerhalb des Atoms soll dabei 0 sein.

Unendlicher Potentialtopf

- Man betrachtet ein Elektron in einem Atom der Breite a als eingeschlossen.
- Die Gesamtkraft auf ein Elektron innerhalb des Atoms soll dabei 0 sein.
- Außerhalb des Atoms ist die potentielle Energie unendlich groß, damit das Elektron nicht entweichen kann.

Unendlicher Potentialtopf

- Man betrachtet ein Elektron in einem Atom der Breite a als eingeschlossen.
- Die Gesamtkraft auf ein Elektron innerhalb des Atoms soll dabei 0 sein.
- Außerhalb des Atoms ist die potentielle Energie unendlich groß, damit das Elektron nicht entweichen kann.
- Dies lässt sich mit einem Topf vergleichen, der unendlich hohe Wände besitzt.

Unendlicher Potentialtopf

- Man betrachtet ein Elektron in einem Atom der Breite a als eingeschlossen.
- Die Gesamtkraft auf ein Elektron innerhalb des Atoms soll dabei 0 sein.
- Außerhalb des Atoms ist die potentielle Energie unendlich groß, damit das Elektron nicht entweichen kann.
- Dies lässt sich mit einem Topf vergleichen, der unendlich hohe Wände besitzt.
- Der Verlauf der potentiellen Energie hat den Verlauf eines Querschnitts eines Topfs, daher eindimensionaler, unendlicher Potentialtopf.

Stehende Wellen im Potentialtopf

- Nach de Broglie ist bekannt, dass die Elektronen eine Welleneigenschaft besitzen.

Stehende Wellen im Potentialtopf

- Nach de Broglie ist bekannt, dass die Elektronen eine Welleneigenschaft besitzen.
- Die Aufenthaltswahrscheinlihckeit eines Elektrons ist dabei direkt proportional zur Amplitude der Wellenfunktion $\Psi(x)$.

Stehende Wellen im Potentialtopf

- Nach de Broglie ist bekannt, dass die Elektronen eine Welleneigenschaft besitzen.
- Die Aufenthaltswahrscheinlihckeit eines Elektrons ist dabei direkt proportional zur Amplitude der Wellenfunktion $\Psi(x)$.
- Da sich das Elektron nur innerhalb des Potentialtopfs aufhalten kann, muss man auch die Wellenfunktion auf diesen Bereich einschränken.

Stehende Wellen im Potentialtopf

- Nach de Broglie ist bekannt, dass die Elektronen eine Welleneigenschaft besitzen.
- Die Aufenthaltswahrscheinlihckeit eines Elektrons ist dabei direkt proportional zur Amplitude der Wellenfunktion $\Psi(x)$.
- Da sich das Elektron nur innerhalb des Potentialtopfs aufhalten kann, muss man auch die Wellenfunktion auf diesen Bereich einschränken.
- Die Wellene wird an den Rändern reflektiert und es kommt zu einer stehenden Welle in dem Potentialtopf.

Stehende Wellen im Potentialtopf

- Nach de Broglie ist bekannt, dass die Elektronen eine Welleneigenschaft besitzen.
- Die Aufenthaltswahrscheinlihckeit eines Elektrons ist dabei direkt proportional zur Amplitude der Wellenfunktion $\Psi(x)$.
- Da sich das Elektron nur innerhalb des Potentialtopfs aufhalten kann, muss man auch die Wellenfunktion auf diesen Bereich einschränken.
- Die Wellene wird an den Rändern reflektiert und es kommt zu einer stehenden Welle in dem Potentialtopf.
- Diese wird beschrieben durch:
  $\Psi(x) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} x\right)$

Lösung der Schrödinger- Gleichung

- Bildung der Ableitungen:

Lösung der Schrödinger- Gleichung

- Bildung der Ableitungen:
-

$$\Psi'(x) = \frac{A \cdot 2\pi}{\lambda} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} x\right)$$

Lösung der Schrödinger- Gleichung

- Bildung der Ableitungen:
- $$\Psi'(x) = \frac{A \cdot 2\pi}{\lambda} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} x\right)$$
- $$\Psi''(x) = -\frac{A \cdot 4\pi^2}{\lambda^2} \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} x\right)$$

Lösung der Schrödinger- Gleichung 2

- Einsetzen der Funktionen für Ψ und Ψ'' in die Schrödinger- Gleichung:

Lösung der Schrödinger- Gleichung 2

- Einsetzen der Funktionen für Ψ und Ψ'' in die Schrödinger- Gleichung:
-

$$-\frac{A \cdot 4\pi^2}{\lambda^2} \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \cdot A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right) = 0$$

Lösung der Schrödinger- Gleichung 2

- Einsetzen der Funktionen für Ψ und Ψ'' in die Schrödinger- Gleichung:
- $$-\frac{A \cdot 4\pi^2}{\lambda^2} \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \cdot A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right) = 0$$
- Damit diese Gleichung für alle x erfüllt wird, muss gelten:

$$-\frac{4\pi^2}{\lambda^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E = 0$$

Lösung der Schrödinger- Gleichung 2

- Einsetzen der Funktionen für Ψ und Ψ'' in die Schrödinger- Gleichung:
- $$-\frac{A \cdot 4\pi^2}{\lambda^2} \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} x\right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \cdot A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} x\right) = 0$$
- Damit diese Gleichung für alle x erfüllt wird, muss gelten:

$$-\frac{4\pi^2}{\lambda^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E = 0$$

- $$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

Energiezustände

Damit ergibt sich mit $\lambda = \frac{2a}{n}$ einmal, dass es sich um diuskrete Energiezustände handeln muss und dass diese berechnet werden können durch:

- $$E_n = \frac{h^2}{8ma^2} \cdot n^2$$

Energiezustände

Damit ergibt sich mit $\lambda = \frac{2a}{n}$ einmal, dass es sich um diuskrete Energiezustände handeln muss und dass diese berechnet werden können durch:

- $$E_n = \frac{h^2}{8ma^2} \cdot n^2$$
- Dieses Ergebnis stimmt mit dem Ergebnis aus dem Bohrschen Atommodell überein.