5.3.2 Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung ist die Bewegungsgleichung der nicht relativistischen Quantenphysik. Wir haben bei der Behandlung der Wellengleichung mehr spielerisch die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen (Potential $V = 0$) „gefunden" und wollen nun etwas näher untersuchen, wie diese deterministische Gleichung interpretiert werden kann. Wir stellen zunächst die Gleichung auf[6]:

schroe.ms

```
> sgl:=I*h*diff(psi(x,t),t)=-h^2/(2*m)*diff(psi(x,t),x$2);
```

$$sgl := I\,h\,\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\,x,t\,)\right) = -\,\frac{1}{2}\,\frac{h^2\,\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\psi(\,x,t\,)\right)}{m}$$

Was passiert, wenn wir außerdem eine möglichst allgemein formulierte Wellenfunktion aufstellen

```
> u:=A(x,t)*exp(I/h*S(x,t));
```

$$u := \mathrm{A}(\,x,t\,)\,\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(\,x,t\,)}{h}\right)}$$

und einsetzen?

```
> psi:=(x,t)->u;
```

$$\psi := (\,x,t\,) \to u$$

```
> sgl;
```

$$I\,h\,\left(\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\mathrm{A}(\,x,t\,)\right)\,\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(\,x,t\,)}{h}\right)} + \frac{I\,\mathrm{A}(\,x,t\,)\,\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right)\,\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(\,x,t\,)}{h}\right)}}{h}\right)$$
$$= -\,\frac{1}{2}h^2\left(\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\mathrm{A}(\,x,t\,)\right)\,\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(\,x,t\,)}{h}\right)} + 2\,\frac{I\,\left(\frac{\partial}{\partial x}\,\mathrm{A}(\,x,t\,)\right)\,\left(\frac{\partial}{\partial x}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right)\,\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(\,x,t\,)}{h}\right)}}{h} + \frac{I\,\mathrm{A}(\,x,t\,)\,\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right)\,\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(\,x,t\,)}{h}\right)}}{h} - \frac{\mathrm{A}(\,x,t\,)\,\left(\frac{\partial}{\partial x}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right)^2\,\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(\,x,t\,)}{h}\right)}}{h^2}\right)\Big/m$$

Wir können zunächst durch u dividieren, dann mit `simplify` weiter vereinfachen und mit `expand` ausmultiplizieren. Man muß Maple ein bißchen helfen, damit „naheliegende" Umformungen auch wirklich durchgeführt werden:

[6] Vereinfachte Maple-Notation: h statt $\hbar$

```
> gl:=sgl/u;
```

$$I\,h\left(\left(\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{A}(x,t)\right)\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(x,t)}{h}\right)}+\frac{I\,\mathrm{A}(x,t)\,\left(\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{S}(x,t)\right)\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(x,t)}{h}\right)}}{h}\right)\Big/\left(\mathrm{A}(x,t)\,\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(x,t)}{h}\right)}\right)=-\frac{1}{2}h^2\left(\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{A}(x,t)\right)\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(x,t)}{h}\right)}+2\,\frac{I\,\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{A}(x,t)\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{S}(x,t)\right)\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(x,t)}{h}\right)}}{h}+\frac{I\,\mathrm{A}(x,t)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{S}(x,t)\right)\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(x,t)}{h}\right)}}{h}-\frac{\mathrm{A}(x,t)\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{S}(x,t)\right)^2\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(x,t)}{h}\right)}}{h^2}\right)\Big/\left(\mathrm{A}(x,t)\,\mathrm{e}^{\left(\frac{I\,\mathrm{S}(x,t)}{h}\right)}m\right)$$

```
> gl:=simplify(gl);
```

$$gl:=\frac{I\,\left(\left(\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{A}(x,t)\right)h+I\,\mathrm{A}(x,t)\left(\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{S}(x,t)\right)\right)}{\mathrm{A}(x,t)}=-\frac{1}{2}\left(\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{A}(x,t)\right)h^2+2\,I\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{A}(x,t)\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{S}(x,t)\right)h+I\,\mathrm{A}(x,t)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{S}(x,t)\right)h-\mathrm{A}(x,t)\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{S}(x,t)\right)^2\right)\Big/(\mathrm{A}(x,t)\,m)$$

```
> gl:=expand(gl);
```

$$gl:=\frac{I\,\left(\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{A}(x,t)\right)h}{\mathrm{A}(x,t)}-\left(\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{S}(x,t)\right)=-\frac{1}{2}\,\frac{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{A}(x,t)\right)h^2}{\mathrm{A}(x,t)\,m}-\frac{I\,\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{A}(x,t)\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{S}(x,t)\right)h}{\mathrm{A}(x,t)\,m}-\frac{1}{2}\,\frac{I\,\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{S}(x,t)\right)h}{m}+\frac{1}{2}\,\frac{\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{S}(x,t)\right)^2}{m}$$

Wenn diese Gleichung erfüllt sein soll, so muß sie für den Realteil und den Imaginärteil erfüllt sein. Wir isolieren also zunächst den Realteil:

```
> rgl:=evalc(Re(lhs(gl)))=evalc(Re(rhs(gl)));
```

$$rgl := -\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right) = -\frac{1}{2}\,\frac{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\mathrm{A}(\,x,t\,)\right)\,h^2}{\mathrm{A}(\,x,t\,)\,m} + \frac{1}{2}\,\frac{\left(\frac{\partial}{\partial x}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right)^2}{m}$$

oder:

```
> "*(-1);
```

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\mathrm{S}(\,x,t\,) = \frac{1}{2}\,\frac{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\mathrm{A}(\,x,t\,)\right)\,h^2}{\mathrm{A}(\,x,t\,)\,m} - \frac{1}{2}\,\frac{\left(\frac{\partial}{\partial x}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right)^2}{m} \tag{5.4}$$

Das ist bis auf den Term mit h^2 die Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\,S(\,x,t\,) = -V - T$$

Wir haben also ein Potential erhalten, ohne eines anzusetzen. Weil dieses Potential charakteristisch für die Quantenphysik ist ($h \neq 0$), nennt Bohm es Quantenpotential ([30], [6]). Wir kommen auf diese Interpretation im nächsten Abschnitt zurück.

Der Imaginärteil der Schrödingergleichung kann nach dem gleichen Muster untersucht werden, indem man ihn zunächst isoliert und dann mit zwei Befehlen umformt:

```
> igl:=evalc(Im(lhs(gl)))=evalc(Im(rhs(gl)));
```

$$igl := \frac{\left(\frac{\partial}{\partial t}\,\mathrm{A}(\,x,t\,)\right)\,h}{\mathrm{A}(\,x,t\,)} = -\frac{\left(\frac{\partial}{\partial x}\,\mathrm{A}(\,x,t\,)\right)\,\left(\frac{\partial}{\partial x}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right)\,h}{\mathrm{A}(\,x,t\,)\,m} - \frac{1}{2}\,\frac{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right)\,h}{m}$$

```
> igl:=igl*A(x,t)/h;
```

$$igl := \frac{\partial}{\partial t}\,\mathrm{A}(\,x,t\,) = \mathrm{A}(\,x,t\,)\left(-\frac{\left(\frac{\partial}{\partial x}\,\mathrm{A}(\,x,t\,)\right)\,\left(\frac{\partial}{\partial x}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right)\,h}{\mathrm{A}(\,x,t\,)\,m} - \frac{1}{2}\,\frac{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right)\,h}{m}\right)\Big/h$$

```
> igl:=expand(igl);
```

$$igl := \frac{\partial}{\partial t}\,\mathrm{A}(\,x,t\,) = -\frac{\left(\frac{\partial}{\partial x}\,\mathrm{A}(\,x,t\,)\right)\,\left(\frac{\partial}{\partial x}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right)}{m} - \frac{1}{2}\,\frac{\mathrm{A}(\,x,t\,)\,\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\mathrm{S}(\,x,t\,)\right)}{m}$$

Nachdem $\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{S}(x,t)/m$ die Geschwindigkeit v des Teilchens ist, wird man an die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\partial\rho}{\partial x}v - \rho\frac{\partial v}{\partial x}$$

erinnert – bis auf den Faktor $1/2$, der dort auftaucht, wo $A(x,t)$ nicht abgeleitet wird. Weil aber die Ableitung einer Wurzelfunktion einen Faktor $1/2$ liefert, kann man es mit folgendem Ansatz versuchen:

```
> subs(A(x,t)=sqrt(rho(x,t)),igl);
```

$$\frac{\partial}{\partial t}\sqrt{\rho(x,t)} = -\frac{\left(\frac{\partial}{\partial x}\sqrt{\rho(x,t)}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{S}(x,t)\right)}{m} - \frac{1}{2}\frac{\sqrt{\rho(x,t)}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{S}(x,t)\right)}{m}$$

```
> eval(");
```

$$\frac{1}{2}\frac{\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t)}{\sqrt{\rho(x,t)}} = -\frac{1}{2}\frac{\left(\frac{\partial}{\partial x}\rho(x,t)\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{S}(x,t)\right)}{m\sqrt{\rho(x,t)}} - \frac{1}{2}\frac{\sqrt{\rho(x,t)}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{S}(x,t)\right)}{m}$$

```
> "*2*sqrt(rho(x,t));
```

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = 2\sqrt{\rho(x,t)}\left(-\frac{1}{2}\frac{\left(\frac{\partial}{\partial x}\rho(x,t)\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{S}(x,t)\right)}{m\sqrt{\rho(x,t)}} - \frac{1}{2}\frac{\sqrt{\rho(x,t)}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{S}(x,t)\right)}{m}\right)$$

```
> cont:=expand(");
```

$$cont := \frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = -\frac{\left(\frac{\partial}{\partial x}\rho(x,t)\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{S}(x,t)\right)}{m} - \frac{\rho(x,t)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{S}(x,t)\right)}{m}$$

Und das ist tatsächlich die Kontinuitätsgleichung. Wenn man also das Amplitudenquadrat (genauer Betragsquadrat) der Wellenfunktion mit der Dichte einer Strömung identifiziert, kommt man zur statistischen Interpretation der Quantenmechanik. $\boxed{\textit{schroe.ms}}$