Die Schrödingergleichung

Im Jahr **1926** formuliert ***Erwin Schrödinger*** die nach ihm benannte **Schrödinger-Gleichung,** eine der klassischen Wellengleichung analoge Wellengleichung zur Beschreibung massenbehafteter Teilchen.
Wie schon die klassische Gleichung setzt auch die Schrödinger-Gleichung räumliche und zeitliche partielle Ableitungen einer Wellenfunktion miteinander in Beziehung. Es ist nicht möglich, die Schrödinger-Gleichung in irgendeiner Weise herzuleiten, genauso wenig, wie sich die newtonschen Gesetze herleiten lassen. Die Schrödingergleichung ist ein ***Axiom*** der Quantenmechanik.
Wie bei jeder fundamentalen Gleichung sollten sich ergebende Konsequenzen jedoch konsistent mit den experimentellen Beobachtungen sein. Obwohl es von diesem Standpunkt aus möglich ist, die Schrödingergleichung einfach zu postulieren, erscheint die Überlegung sinnvoll, wie eine Wellengleichung für ein Teilchen aussehen könnte.
Wir greifen dazu auf die Wellengleichung für Photonen, d.h. auf die des Lichtes, zurück.
Als Wellenfunktion wählen wir das elektrische Feld $E(x,t)$. Die Wellengleichung lautet:

$$\frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2}.$$

Eine wichtige Klasse von Lösungen dieser Gleichung bilden die harmonischen Wellen $E(x,t) = E_0 \sin(kx - \omega \cdot t)$. Differenzieren wir $E(x,t)$ zweimal nach t, so erhalten wir

$$\frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2} = -\omega^2 E_0 \sin(kx - \omega \cdot t),$$

zweimaliges differenzieren nach x ergibt

$$\frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial x^2} = -k^2 E_0 \sin(kx - \omega \cdot t).$$

Setzen wir dieses Ergebnis in $\frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2}$ ein, sehen wir, dass $E(x,t)$ genau dann eine Lösung der Wellengleichung ist, wenn die Kreisfrequenz ω und die Wellenzahl k die Bedingung

$$-k^2 = -\frac{\omega^2}{c^2}$$

bzw.

$$\omega = kc$$

erfüllen. Multiplizieren wir beide Seiten mit $\hbar$, so erkennen wir in dieser Bedingung die Relation zwischen Energie E und Impuls p eines Photons:

$$E = pc\,.$$

Wir verwenden nun die de Broglie Gleichung, um eine zu $\omega = kc$ analoge Bedingung an ω und k für ein massives Teilchen zu finden. Ist m die Masse des Teilchens und V seine potentielle Energie, so gilt für seine Gesamtenergie:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V\,.$$

Setzen wir für E und p die Energie und den Impuls aus der de Broglie Gleichung

$$E = hf = \hbar\omega \quad \text{und} \quad p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

ein, so ergibt sich folgende Bedingung für ω und k:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V\,.$$

Diese Bedingung unterscheidet sich von $\omega = kc$ darin, dass sie die potentielle Energie *V* enthält und ω nicht mehr linear mit *k* zusammenhängt.
Beim Differenzieren der Wellenfunktion $E(x,t)$ haben wir jeweils einen Faktor ω erhalten bei der Differentiation nach der Zeit *t* und einen Faktor *k* bei der Differentiation nach dem Ort *x*.

Die Tatsache, dass in $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V$ die Größen ω und k^2 vorkommen, legt daher die Vermutung nahe, dass die Wellengleichung für ein Teilchen die zweite partielle Ableitung der Wellenfunktion nach dem Ort enthält, im Gegensatz zu der klassischen Wellengleichung $\frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2}$ jedoch nur die erste partielle Ableitung nach der Zeit.
Außerdem sollte in der Wellengleichung für ein Teilchen dessen potentielle Energie auftauchen.
Wir postulieren nun die **zeitabhängige eindimensionale Schrödinger-Gleichung**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}\,.$$

Ein wichtiger Unterschied zwischen den klassischen Wellengleichungen und der zeitabhängigen Schrödingergleichung liegt in der expliziten Verwendung der imaginären Zahl $i^2 = -1$.
Es ist daher zu erwarten, das auch die Lösungen der Schrödingergleichung komplex sein können.
Für den stationären Fall, d.h. einer von der **Zeit unabhängigen** potentiellen Energie $V(x)$, lässt sich die Schrödingergleichung zur **zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung** vereinfachen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)\,.$$

Für den stationären Fall lässt sich durch Anwendung der eindimensionalen Schrödingergleichung zeigen, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte den Wert **eins** annimmt.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2\, dx = 1$$