Einfaches zur Schrödinger-Gleichung

Caroline Lasser, 24. Oktober 2011

Die Wellenfunktion $\psi : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ erfüllt die Schrödinger-Gleichung

$$i\partial_t \psi(x,t) = -\frac{1}{2m}\Delta\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t), \qquad \psi(x,0) = \psi_0(x).$$

Statistische Interpretation. $\int_\Omega |\psi(x,t)|^2 dx$ ist die Wahrscheinlichkeit, das System zur Zeit t in $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ zu finden.

Fourier-Transformation. Sei $\mathcal{S} = \{f \in C^\infty \mid \forall \alpha, \beta : \|x^\alpha \partial^\beta f(x)\|_\infty < \infty\}$. Die Fourier-Transformation

$$\mathcal{F} : \mathcal{S} \to \mathcal{S}, \quad (\mathcal{F}\psi)(k) = \widehat{\psi}(k) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ik\cdot x} \psi(x) dx$$

ist eine Bijektion mit $(\mathcal{F}^{-1}\psi)(x) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{ik\cdot x} \psi(k) dk$. Es gilt

$$-i\widehat{\partial_j \psi}(k) = k_j \widehat{\psi}(k), \qquad -\widehat{\Delta\psi}(k) = |k|^2 \widehat{\psi}(k).$$

Freie Schrödinger-Gleichung.

$$i\partial_t \widehat{\psi}(x,t) = \frac{1}{2m}|k|^2 \widehat{\psi}(k,t), \qquad \widehat{\psi}(k,0) = \widehat{\psi_0}(k).$$

Lösung: $\widehat{\psi}(k,t) = e^{-\frac{i}{2m}|k|^2 t}\,\widehat{\psi_0}(k)$. Sei $T = -\frac{1}{2m}\Delta$. Der Lösungsoperator

$$e^{-itT} : \mathcal{S} \to \mathcal{S}, \qquad \psi(x) \mapsto (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i(k\cdot x - \frac{1}{2m}|k^2|t)}\, \widehat{\psi}(k) dk$$

setzt sich eindeutig zu $e^{-iT} : L^2 \to L^2$ fort.

Schrödinger-Gleichung mit Potential. Ist $H : D(H) \to L^2$, $\psi \mapsto (T+V)\psi$ selbst-adjungiert, so gibt es einen Lösungsoperator $e^{-itH} : L^2 \to L^2$, so dass $\psi(x,t) = e^{-itH}\psi_0(x)$ für alle $\psi_0 \in D(H)$ die Schrödinger-Gleichung erfüllt. Die Operatoren sind unitär,

$$\forall \psi, \phi \in L^2 : \langle e^{-itH}\psi, e^{-itH}\phi\rangle = \langle \psi, \phi\rangle,$$

und damit norm-erhaltend, $\forall \psi \in L^2 : \|e^{-itH}\psi\| = \|\psi\|$. Insbesondere ist $(e^{-itH})_{t\in\mathbb{R}}$ eine Gruppe.

Literatur: I.2 und I.3 in C. Lubich, From Quantum to Classical Molecular Dynamics, EMS, 2008.