

## Einfaches zur Schrödinger-Gleichung

Caroline Lasser, 24. Oktober 2011

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

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

**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

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

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

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

**Freie Schrödinger-Gleichung.**

$$i\partial_t \widehat{\psi}(k, t) = \frac{1}{2m} |k|^2 \widehat{\psi}(k, t), \quad \widehat{\psi}(k, 0) = \widehat{\psi}_0(k).$$

Lösung:  $\widehat{\psi}(k, t) = e^{-\frac{i}{2m}|k|^2 t} \widehat{\psi}_0(k)$ . Sei  $T = -\frac{1}{2m} \Delta$ . Der Lösungsoperator

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

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

**Schrödinger-Gleichung mit Potential.** Ist  $H : D(H) \rightarrow L^2$ ,  $\psi \mapsto (T + V)\psi$  selbst-adjungiert, so gibt es einen Lösungsoperator  $e^{-itH} : L^2 \rightarrow L^2$ , 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.