Differentialgleichungen – eine Kurzeinführung

1 Differentialgleichungen – ein fundamental neuer Gleichungstyp

In der bisherigen Mathematik haben wir eine Vielzahl von Gleichungen angetroffen. Je nach Gleichungstyp gab es unterschiedlich viele Lösungen und immer wieder andere Lösungsverfahren. Ein paar Beispiele:

- Lineare Gleichung (LG) in 1 Unbekannten: ax = b mit $a \neq 0$ \Rightarrow genau 1 Lösung x, Verfahren: Separation.
- LG in 2 Unbekannten (Geradengleichung): ax + by = c mit entweder a oder $b \neq 0$ $\Rightarrow \infty$ -viele Lösungspunkte (x, y), bilden eine Gerade in einem x-y-Koordinatensystem.
- LG in 3 Unbekannten (Ebenengleichung): ax + by + cz = d mit a, b oder $c \neq 0$ $\Rightarrow \infty$ -viele Lösungspunkte (x, y, z), bilden eine Ebene in einem x-y-z-Koordinatensystem.
- Quadratische Gleichung (QG) in 1 Unbekannten: $ax^2 + bx + c = 0$ mit $a \neq 0$ $\Rightarrow 0$, 1 oder 2 Lösungen x, sind die Nullstellen einer Parabel, Verfahren allg.: Quadratische Ergänzung resp. Mitternachtsformel, spez.: Binomische Formel resp. Zweiklammeransatz.
- Exponentialgleichung in 1 Unbekannten: $a^x = b$ mit a, b > 0 \Rightarrow genau 1 Lösung x, Verfahren: Logarithmieren.

So unterschiedlich diese Gleichungstypen auch waren, eines haben sie alle gemeinsam: Ihre Lösungen sind einzelne Punkte in einem ein- oder mehrdimensionalen Koordinatensystem.¹

Nun wenden wir uns hingegen einem neuen Gleichungstyp zu, dessen Lösungen einer fundamental anderen Objektklasse angehören. Bei sogenannten **Differentialgleichungen (DGLs)** sind die Lösungen nämlich ganze Funktionen f(x), also Zuordnungsvorschriften von einer Variable x zu einer davon abhängigen Grösse f(x). Gesucht sind alle Funktionsvorschriften f(x), welche die durch die DGL beschriebenen Anforderungen erfüllen, also eben die DGL lösen.

Das tönt im Moment wohl etwas abstrakt und bedarf daher sicher einiger Erläuterung...

1.1 Was ist eine Differentialgleichung (DGL)?

Die folgenden Ausführungen sind sinngemäss dem Buch Rechenmethoden für Studierende der Physik im ersten Jahr von Markus Otto entnommen:

Allgemeine Definition: Eine gewöhnliche Differentialgleichung (DGL) ist eine Gleichung, in welcher Terme mit den Ableitungen einer gesuchten Funktion f(x) auftreten. In der Gleichung können zudem die Funktion f(x), wie auch die Variable x vorkommen.

Eine DGL zu lösen bedeutet, alle möglichen Funktionen f(x) zu finden, welche die DGL für alle erlaubten Werte der Variable x erfüllen.

Ordnung der DGL: Definition: $f^{(n)}(x) \equiv n$ -te Ableitung von f(x). Ist $f^{(n)}(x)$ die höchste in der DGL vorkommende Ableitung, so sprechen wir von einer DGL n-ter **Ordnung**.

¹Eine einzelne Lösung x sitzt ja auch an irgendeinem Punkt auf einem Zahlenstrahl (= x-Achse), also in einem eindimensionalen Koordinatensystem.

Lineare und homogene DGLs: Eine DGL heisst **linear**, wenn die unbekannte Funktion f(x) und ihre Ableitungen darin linear auftreten. D.h., die DGL enthält lauter einzelne Terme mit Potenz 1 von f(x), f'(x), f''(x), etc. Die allgemeinste lineare DGL n-ter Ordnung lautet daher:

$$a_0(x)f(x) + a_1(x)f'(x) + a_2(x)f''(x) + \dots + a_n(x)f^{(n)}(x) = r(x)$$
(1)

Darin sind $a_0(x), a_1(x), \ldots, a_n(x)$ beliebige Funktionen der Variable x.

Ist die **Störfunktion** r(x) = 0, so spricht man von einer **homogenen** (linearen) DGL.

Lösungen: Eine lineare, homogene DGL n-ter Ordnung besitzt n linear unabhängige **Einzellösungen** $f_1(x), \ldots, f_n(x)$. Die **allgemeine Lösung** ergibt sich dann als **Linearkombination** der Einzellösungen:

$$f(x) = C_1 f_1(x) + C_2 f_2(x) + \ldots + C_n f_n(x)$$
(2)

Dabei sind die Koeffizienten C_1, \ldots, C_n zunächst frei wählbare Zahlenwerte. D.h., es gibt nicht eine einzige, eindeutige Lösung der DGL, sondern eine unendlich grosse **Lösungsschar**, deren einzelnes Element durch eine bestimmte Koeffizientenkombination (C_1, \ldots, C_n) gegeben ist.

Bei einer linearen, aber inhomogenen DGL n-ter Ordnung gibt es ebenfalls eine Lösungsschar mit n Parametern C_1, \ldots, C_n , allerdings muss sich die allgemeine Lösung nicht als Linearkombination schreiben lassen, bei der diese C's die Rolle von Koeffizienten der Einzellösungen übernehmen.

Rand- resp. Anfangsbedingungen (RBs): Da die Lösung einer DGL, wie eben erläutert, nicht eindeutig ist, braucht es zusätzliche Bedingungen (Gleichungen), um die Funktion f(x) vollständig festzulegen. Diese sogenannten Anfangs- oder Randbedingungen (RBs) sind in der Regel Teil des Problems, für das die DGL die Lösung liefern soll.

Sind bei einer linearen DGL n-ter Ordnung zusätzlich n RBs vorgegeben, so werden dadurch die Koeffizienten C_1, \ldots, C_n in eindeutiger Weise festgelegt.

Ermittlung der Lösungen einer DGL: Trotz einiger raffinierter Verfahren für verschiedene Arten von DGLs gibt es **kein Patentrezept** für *die* Lösung einer DGL. Oftmals ist Raten ein guter erster Schritt. Aber am meisten hilft viel Erfahrung und vor allem ein solides, also ohne Nachschlagen präsentes (!) Grundwissen über Ableitungsregeln und die Ableitungen elementarer Funktionen.

Allerdings ist es so, dass nur zu verhältnismässig wenigen DGLs überhaupt eine **analytische Lösung**, also eine in Form eines geschlossenen mathematischen Ausdrucks notierbare Funktion, existiert. Damit meint man nicht, dass in allen anderen Fällen gar keine Lösung existiert, aber die DGL ist dann halt nur sogenannt **numerisch** lösbar. Das bedeutet, man kann sich der Lösungsfunktion durch Verwendung bestimmter Rechenmethoden im Prinzip beliebig genau annähern, aber die Lösung selber, also die Grenzfunktion dieser Annäherung, kann einfach nicht so geschlossen aufgeschrieben werden, wie wir uns das für Funktionen bisher gewohnt waren.³ Die Ausführung solcher Annäherungsrechnungen überlassen wir heutzutage dem Computer.

Hinweis: In diesem Ergänzungsfach wird es nur wenige Male darum gehen DGLs selber zu lösen. Mit diesem Thema alleine könnte man problemlos ein ganzes Jahr füllen. Hingegen sollten wir einerseits in der Lage sein die Richtigkeit einer vorgegebenen Lösung zu überprüfen, andererseits aus den RBs allfällige Parameter zu ermitteln. Beides ist wesentlich einfacher als das Aufspüren von Lösungen, denn dazu brauchen wir "lediglich" die angegebene Lösung in die DGL einzusetzen, wofür es im Wesentlichen das Ableiten zu beherrschen gilt...

²Linear unabhängig bedeutet, dass keine Einzellösungen $f_i(x)$ ein Vielfaches einer anderen Einzellösung $f_j(x)$ ist: $f_i(x) \neq k \cdot f_j(x)$ mit $k \in \mathbb{R}$ oder $k \in \mathbb{C}$.

 $^{^3}$ Das ist vergleichbar damit, dass wir z.B. die Zahl $\sqrt{2}$ als Dezimalzahl auch nicht ganz genau aufschreiben können, obwohl wir genau wissen, dass diese Zahl existiert und die positive Lösung der Gleichung $x^2=2$ ist.

2 Erste Beispiele von DGLs

2.1 Integralrechnung: Stammfunktionen bestimmen

In der Integralrechnung lösen wir andauernd einfache DGLs, nämlich immer dann, wenn wir eine **Stammfunktion** F(x) zu einer vorgegebenen Funktion f(x) bestimmen. Die zugehörige DGL lautet jeweils:

$$F'(x) = f(x) \tag{3}$$

Das ist eine **nicht-homogene**, **lineare DGL 1. Ordnung** für F(x). In der Integralrechnung lernen wir, dass die gesuchte Funktion F(x) dem **unbestimmten Integral** von f(x) entspricht:

$$F(x) = \int f(x) \, \mathrm{d}x + C \tag{4}$$

Wie es sich für eine DGL 1. Ordnung gehört, taucht hier ein einzelner **Parameter** C auf – auch bekannt als **Integrationskonstante**. Die DGL liefert somit eine ganze Lösungsschar von Funktionen F(x).

Beispiel: Gesucht sei die Lösung folgender DGL (inkl. RB):

$$F'(x) = \frac{1}{4}x^2 - \frac{4}{3}x + \frac{4}{3}$$
 mit RB: $F(2) = 1$ (5)

Für die Stammfunktion (unbestimmtes Integral) erhalten wir:

$$F(x) = \int \left(\frac{1}{4}x^2 - \frac{4}{3}x + \frac{4}{3}\right) dx + C = \frac{1}{12}x^3 - \frac{2}{3}x^2 + \frac{4}{3}x + C$$

Aus der RB lässt sich schliesslich der Wert des Parameters $\mathcal C$ bestimmen:

$$F(2) = \frac{2}{3} - \frac{8}{3} + \frac{8}{3} + C = \frac{2}{3} + C \stackrel{!}{=} 1 \implies C = \frac{1}{3}$$

Somit erhalten wir für die Lösungsfunktion zu unserem konkreten Problem (5):

$$F(x) = \frac{1}{12}x^3 - \frac{2}{3}x^2 + \frac{4}{3}x + \frac{1}{3}$$

Abb. 1 zeigt die Funktion für verschiedene Werte von C. Es handelt sich immer um dieselbe Kurve, allerdings auf verschiedenen Höhen. Das muss ja so sein, denn die DGL F'(x) = f(x) schreibt lediglich vor, welche Steigung des G_F zu welcher Stelle x gehört. Die RB F(2) = 1 fixiert den Graphen auf einer bestimmten Höhe, denn der Punkt (2,1) soll auf dem Funktionsgraphen liegen.

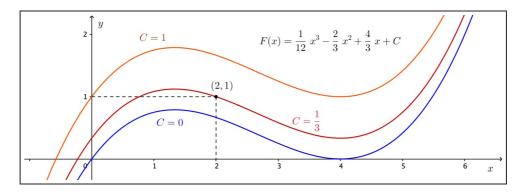


Abbildung 1: Das graphische Verständnis des unbestimmten Integrals. Erst die Randbedingung F(2)=1 legt schliesslich fest, auf welcher Höhe der Graph verläuft.

2.2 Exponentialfunktionen – beim Ableiten "unkaputtbar"

Betrachten wir jetzt die folgende **homogene, lineare DGL 1. Ordnung** für die Funktion f(x). Darin sei $k \neq 0$ eine beliebige Zahl:

$$f'(x) = kf(x)$$
 resp. $f'(x) - kf(x) = 0$ mit RB: $f(0) = a$ (6)

Halten wir kurz inne und fragen uns, ob man diese Lösung nicht einfach erraten kann: Gesucht ist eine Funktion f(x), deren Ableitung f'(x) bis auf den konstanten Vorfaktor k wieder sich selber sein soll. Für k=1 wäre dann sogar f'(x)=f(x). Welche Funktion erfüllt grundsätzlich die Anforderung, dass ihre Ableitung immer noch dieselbe Funktion ist? Genau: die **Exponentialfunktion** e^x !

Jetzt müssen wir noch dafür sorgen, dass beim Ableiten ein Vorfaktor k rausspringt. Das k muss das Resultat der **inneren Ableitung** sein (Stichwort: Kettenregel!). Die Einzellösung $f_1(x)$ lautet daher:

$$f_1(x) = e^{kx} \tag{7}$$

Da DGLs 1. Ordnung nur eine einzige Einzellösung besitzen, sind wir schon fertig. Für die allgemeine Lösung müssen wir einfach noch einen Vorfaktor C anfügen:

$$f(x) = Cf_1(x) = Ce^{kx}$$
 \Rightarrow $f'(x) = Ce^{kx} \cdot k = kf(x)$

Als multiplikative Konstante bleibt der Vorfaktor C beim Ableiten einfach erhalten.

Bestimmen wir schliesslich aus der RB noch den konkreten Wert von C:

$$f(0) = C \cdot e^{k \cdot 0} = C \stackrel{!}{=} a \qquad \Rightarrow \qquad f(x) = ae^{kx} \tag{8}$$

Würdigung der Euler'schen Zahl e: Wir bemerken, welch spezielle Eigenschaft die Euler'sche Zahl $e \approx 2.718$ aufweist! Die Exponentialfunktion mit Basis e, also $f(x) = Ce^x$, ist die einzige von der trivialen Funktion f(x) = 0 verschiedene Funktion, die beim Ableiten genau gleich bleibt. Dies zeichnet e aus und macht diese Zahl quasi zur "natürlichen Basis" für sämtliche Exponentialfunktionen in Mathematik und Naturwissenschaft. Mit keiner anderen Basis lassen sich Exponentialfunktionen so leicht handhaben.

Abb. 2 erläutert eine graphische Konsequenz von $[e^x]'=e^x$: Der Funktionsgraph von $f(x)=Ce^x$ hat die interessante Eigenschaft, dass die y-Koordinate jedes Punktes auf dem Graphen auch gerade angibt, wie steil der Graph durch diesen Punkt hindurch verläuft.

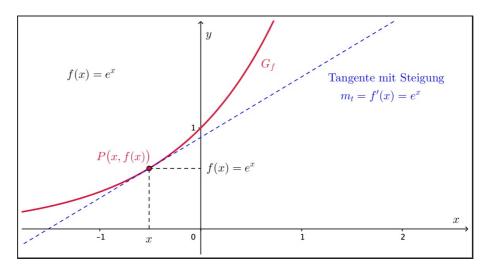


Abbildung 2: Die spezielle Eigenschaft der Exponentialfunktion e^x : In jedem Punkt $P(x, e^x)$ auf dem Funktionsgraphen besitzt die zugehörige Tangente die Steigung e^x .

2.3 Sinus- und Cosinusfunktion

Erneut betrachten wir eine **homogene**, **lineare DGL**, diesmal allerdings **2**. **Ordnung**, weshalb zur eindeutigen Lösung nun zwei RBs benötigt werden. Auch hier sei k eine beliebige Zahl $\neq 0$:

$$f''(x) = -kf(x)$$
 mit RBs: $f(0) = A$ und $f'(0) = 0$ (9)

Hier lautet die Frage zur DGL: "Welche Funktion f(x) hat die Eigenschaft, dass ihre 2. Ableitung f''(x) das Negative der Funktion selber ist?"

Wer sich mit Funktionsableitungen auskennt, wird sofort ausrufen: "Die Sinusfunktion!" Klar: $[\sin x]' = \cos x$ und $[\cos x]' = -\sin x$, also in der Kombination: $[\sin x]'' = -\sin x$.

"Aber Cosinus doch auch!" ruft jemand anders. Tatsächlich: $[\cos x]'' = [-\sin x]' = -\cos x$.

Und schon haben wir die beiden Einzellösungen gefunden – zumindest fast: Wir müssen noch die Konstante k einbauen. Das ist aber keine grosse Sache mehr, denn wiederum handelt es sich um einen Faktor, der als Resultat der inneren Ableitung entsteht, diesmal allerdings doppelt. Benutzen wir für f(x) den Ansatz $f(x) = \sin(\lambda x)$, so finden wir:

$$f''(x) = [\sin(\lambda x)]'' = [\lambda \cos(\lambda x)]' = -\lambda^2 \sin(\lambda x)$$

Diesen Ausdruck setzen wir in die gegebene DGL ein und erhalten:

$$f''(x) = -k \cdot f(x)$$
 \Rightarrow $-\lambda^2 \sin(\lambda x) = -k \sin(\lambda x)$ \Leftrightarrow $\lambda^2 = k$

Der Ausdruck $\sin(\lambda x)$ streicht sich weg. Somit ist die DGL an allen Orten x erfüllt, sofern $\lambda^2=k$ ist. Auf gleiche Weise lässt sich das auch mit der Cosinusfunktion zeigen und somit lautet die allgemeine Lösung der DGL:

$$f(x) = C_1 \sin(\lambda x) + C_2 \cos(\lambda x)$$
 mit $\lambda = \sqrt{k}$ (10)

Was sagen die RB's über die Werte von C_1 und C_2 ? Notieren wir f(x) und f'(x) nochmals und setzen die RBs ein:

$$f(x) = C_1 \sin(\lambda x) + C_2 \cos(\lambda x) \quad \Rightarrow \quad f(0) = 0 + C_2 \stackrel{!}{=} A \quad \Rightarrow \quad C_2 = A$$
$$f'(x) = \lambda C_1 \cos(\lambda x) - \lambda C_2 \sin(\lambda x) \quad \Rightarrow \quad f'(0) = \lambda C_1 + 0 \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad C_1 = 0$$

Somit lautet unser Schlussresultat:

$$f(x) = A\cos(\lambda x)$$
 mit $\lambda = \sqrt{k}$ (11)

Dieses Resultat ist bei Betrachtung der RBs nicht weiter erstaunlich: Bei x=0 soll die Funktion irgendeinen Wert A annehmen. Die Sinusfunktion ist dort aber gleich Null, somit muss das schon die Cosinusfunktion hinkriegen. Ausserdem soll die Steigung bei x=0 gleich Null sein. Das trifft für die Cosinusfunktion zu, aber für die Sinusfunktion eben nicht. Somit muss es sich bei der gesuchten Funktion um eine reine Cosinusfunktion handeln.

Bemerke! Als RB kann auch eine Wertfestlegung für eine Ableitung benutzt werden. Hier war dies mit f'(0) = 0 der Fall.

Ergänzung: Aus $\lambda^2=k$ könnte auch $\lambda=-\sqrt{k}$ folgen. Damit würden aber aufgrund der Symmetrieeigenschaften von Cosinus- und Sinusfunktion keine Lösungen entstehen, die nicht schon durch (10) abgedeckt wären, denn $\cos(-a)=\cos a$ und $\sin(-a)=-\sin a$. Beim Sinus würde sich bei einer bestimmten Lösung einfach $-C_1$ statt C_1 ergeben.

2.4 Ein letztes Beispiel

Schauen wir uns noch ein Beispiel für eine **lineare, inhomogene DGL 2. Ordnung** an – ohne grossen Kommentar. An anderer Stelle werden wir genauer erfahren, worum es sich hier handelt, auch wenn es sich schon erahnen lässt.

Um uns formal ein bisschen herauszufordern, heisst die Variable nun allerdings t und die davon abhängige, gesuchte Funktion ist x(t):

$$x''(t) = a = \text{const.}$$
 mit RBs: $x(0) = x_0$ und $x'(0) = v_0$ (12)

Kennen wir die 2. Ableitung der Funktion, so erhalten wir die allgemeine Lösung durch zweimaliges unbestimmtes Integrieren:

$$x'(t) = \int x''(t) dt + C_1 = \int a dt + C_1 = at + C_1$$
$$x(t) = \int x'(t) dt + C_2 = \int (at + C_1) dt + C_2 = \frac{a}{2} t^2 + C_1 t + C_2$$

Wir nehmen zu Kenntnis, dass bei der zweimaligen Integration die Integrationskonstante C_1 des ersten unbestimmten Integrals ins zweite unbestimmte Integral mitgenommen werden muss.

Aus den RBs folgt für C_1 und C_2 :

$$x(0) = C_2 \stackrel{!}{=} x_0$$
 und $x'(0) = C_1 \stackrel{!}{=} v_0$

Daraus ergibt sich schliesslich für die fertige Lösung (und ihre 1. Ableitung):

$$x(t) = x_0 + v_0 t + \frac{a}{2} t^2$$
 und $x'(t) = v_0 + at$

Na, kommt uns das irgendwie bekannt vor?

3 Funktionen mit mehreren Variablen und partielle Ableitungen

3.1 Die Notation partieller Ableitungen

In Mathematik und Physik kann es durchaus vorkommen, dass eine Funktion von mehreren Variablen resp. dass eine Grösse von mehreren anderen Grössen abhängt: f = f(x, y, ...).

Beispiel: Die Zentripetalkraft F_Z , also die resultierende Kraft, die notwendig ist, um einen Körper der Masse m auf einer Kreisbahn mit Radius r zu halten, wenn seine Bahngeschwindigkeit v beträgt, ist laut Newton gegeben durch:

$$F_{\rm Z} = \frac{mv^2}{r}$$

Bei konstanter Körpermasse m hängt $F_{\rm Z}$ nur noch von v und r ab und wir können schreiben:⁴

$$F_{\rm Z} = F_{\rm Z}(v, r)$$

D.h., wir notieren F_Z ganz explizit als **Funktion** der zwei Grössen v und r.

Nun kann man sich fragen, wie sich $F_{\rm Z}$ verändert, wenn ich den Bahnradius r unverändert lasse und nur die Bahngeschwindigkeit v variiere.

⁴Natürlich hängt $F_{\rm Z}$ immer noch von der Masse m ab, aber dieses m wird sich bei vorgegebenem Körper im Verlauf der Bewegung nicht ändern und muss deshalb nicht mehr als Variable (= "Veränderliche") angeschaut werden.

Es verwundert nicht allzu sehr, dass wir die Antwort auf diese Frage durch Ableitung von F_Z nach v erhalten. Da wir F_Z als Funktion von v und v ansehen, hier aber nur nach v ableiten wollen, spricht man von einer **partiellen Ableitung** und verwendet dafür statt des üblichen d's das stilisierte ∂ :

$$\frac{\partial F_{\mathbf{Z}}}{\partial v} = \frac{2mv}{r}$$

Lassen wir stattdessen die Geschwindigkeit konstant und fragen uns, wie sich die resultierende Kraft in Abhängigkeit des Bahnradius r verändert, so ergibt sich für die andere partielle Ableitung:

$$\frac{\partial F_{\rm Z}}{\partial r} = -\frac{mv^2}{r^2}$$

3.2 Weshalb verwendet man für partielle Ableitungen eine andere Notation?

Die Antwort auf diese Frage ist für unsere weiteren Betrachtungen zwar nicht so wichtig, schaden kann sie aber wohl kaum: Sind sich in unserem Beispiel von oben die Geschwindigkeit v und der Bahnradius r gleichzeitig am verändern, so existieren zwei infinitesimale Veränderungen $\mathrm{d}v$ und $\mathrm{d}r$, die erst **zusammen** die infinitesimale Veränderung $\mathrm{d}F_{\mathrm{Z}}$ festlegen. Dieses $\mathrm{d}F_{\mathrm{Z}}$ bezeichnet man deshalb auch als das **totale Differential** von F_{Z} und es gilt:

$$dF_{Z} = \frac{\partial F_{Z}}{\partial v} \cdot dv + \frac{\partial F_{Z}}{\partial r} \cdot dr$$

Mit dem leicht modifizierten Differential-Symbol ∂ will man nun speziell darauf hinweisen, dass bei einer partiellen Ableitung nur eine einzige Variable verändert wird. Die anderen Variablen werden konstant gehalten. Auf diesem Hintergrund können wir verstehen, dass in der obigen Zeile $\mathrm{d}F_{\mathrm{Z}}$ etwas wesentlich anderes als ∂F_{Z} meint: $\mathrm{d}F_{\mathrm{Z}}$ ist die infinitesimale Veränderung von F_{Z} bei infinitesimalen Veränderungen $\mathrm{d}v$ und $\mathrm{d}r$, währenddem ∂F_{Z} im Ausdruck $\frac{\partial F_{\mathrm{Z}}}{\partial v}$ für die infinitesimale Veränderung von F_{Z} steht, wenn sich einzig v am verändern ist.

Das tönt jetzt vielleicht alles etwas theoretisch, ist aber halb so wild! Wichtig ist abschliessend nochmals einfach dies:

Sobald eine Funktion von mehreren Variablen abhängt, z.B. f(x,y), schreiben wir für die Ableitung nach einer dieser Variablen, z.B. nach y, nun $\frac{\partial f}{\partial y}$ und nennen dies die partielle Ableitung von f nach y.

3.3 Unser zentrales Beispiel: Wellenfunktion und Schrödingergleichung

Wie wir im Quantenmechanik-Buch von D.J. Griffiths ⁶ ganz zu Beginn des ersten Kapitels lesen, ist die **Wellenfunktion** $\Psi(x,t)$ jeweils die Lösung der **Schrödinger-Gleichung:**

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi \tag{13}$$

Ohne im Moment darauf einzugehen, was diese Wellenfunktion ist, stellen wir fest, dass es sich offenbar um eine Funktion Ψ handelt, die vom Ort x und von der Zeit t, also von zwei Variablen abhängt. Jedem Ort x wird zu jedem Zeitpunkt t ein Funktionswert $\Psi(x,t)$ zugeordnet.

⁵ "Partiell" ist zu verstehen als "teilweise": Es wird nur nach einer einzigen Variable, also nur nach einem einzelnen Bestandteil des gesamten Variablenkatalogs abgeleitet.

⁶Griffiths 2012, S. 22.

Dem entsprechend treten in der Schrödinger-Gleichung (13) eben partielle Ableitungen auf – auf der linken Seite die einfache Ableitung $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ nach der Zeit t, rechts die zweifache Ableitung $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ nach dem Ort x. Die Schrödinger-Gleichung ist somit eine **partielle Differentialgleichung**. Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung sind Funktionen $\Psi(x,t)$, welche die Gleichung für alle Orte x und alle Zeiten t erfüllen!⁷

Etwas später⁸ werden wir die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ durch den Ansatz einer **Variablenseparation** in einen nur noch vom Ort x abhängigen Teil $\psi(x)$ und einen nur noch von der Zeit t abhängigen Teil $\varphi(t)$ auftrennen:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \varphi(t)$$

Setzt man diesen Ansatz in die Schrödinger-Gleichung ein, so folgen daraus zwei neue Differentialgleichungen, eine für $\psi(x)$ und eine für $\varphi(t)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V\psi = E\psi \qquad \text{und} \qquad \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}\varphi \tag{14}$$

Wir bemerken, dass in diesen neuen DGLs nun wieder das d anstelle des ∂ auftaucht, weil $\psi(x)$ und $\varphi(t)$ je nur noch von einer einzigen Variable abhängen.

Da lässt sich doch etwas wiedererkennen! Schauen wir in (14) die rechte der beiden neuen DGLs an: Die Ableitung $\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}$ ist bis auf den Vorfaktor $-\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}$ gleich der Funktion $\varphi(t)$ selber... Klingelt da was? Na klar: Die Lösung muss eine Exponentialfunktion sein, denn es handelt sich um die DGL (6) von Seite 4 und somit muss sich die Lösung (8) ergeben:

$$\varphi(t) = ae^{-\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}t} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = ae^{-\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}t} \cdot \left(-\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}\right) = -\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}\varphi(t) \quad \checkmark$$

Anmerkung: Im Kontext von Funktionen mit mehreren Variablen können wir nun gut nachvollziehen, weshalb sich die Strich-Schreibweise f'(x) im Prinzip nur für Funktionen mit einer einzigen Variable eignet. Was soll denn bitte f'(x,y) bedeuten? Wonach wird da abgeleitet? Das sollte doch explizit gesagt werden! Die differenzielle Schreibweise $\frac{\partial f}{\partial x}$ resp. $\frac{\partial f}{\partial y}$ bringt das hingegen ganz klar zum Ausdruck.

3.4 Differentialoperatoren und mehrfache Ableitungen

Wir verstehen nun ebenfalls, dass das "Ableiten nach einer bestimmten Variable" als sogenannter **Dif- ferentialoperator** notiert werden kann, z.B.:

Differential operator für die Ableitung nach
$$x$$
: $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ $\left(\text{resp. }\frac{\partial}{\partial x}\right)$

Solche (Differential-)Operatoren müssen offensichtlich auf Funktionen angewendet werden. Das kann auch mehrfach passieren, wie wir es oben bereits gesehen haben. Z.B. schreibt man für die zweite Ableitung nach x:

$$f''(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f'(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}$$

Achtung! Die zweite Ableitung ist nicht mit dem Quadrat einer ersten Ableitung zu verwechseln:

$$f''(x) = \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2} \neq \left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right)^2 = \left(f'(x)\right)^2$$

⁷Klar: Solche partiellen DGLs sind nochmals eine Klasse für sich. Damit setzen wir uns dann ganz konkret und länger als an dieser Stelle bei der Betrachtung von Lösungen der Schrödinger-Gleichung auseinander.

⁸Griffiths 2012, S. 48.