ΕΞΙΣΩΣΗ SCHRODINGER

Κυματοσυνάρτηση: $\psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις de Broglie:

$E = \hbar\omega \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar},\ \ p = \hbar k \Rightarrow k = \frac{p}{\hbar}$ η παραπάνω γίνεται

$$\psi(x,t) = e^{i(px-Et)/\hbar} \quad (\mathbf{1})$$

Είναι: $\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar}e^{i(px-Et)/\hbar} = -i\frac{E}{\hbar}\psi \quad (\mathbf{2})$

Δηλαδή $\hat{E} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{i^2}\frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow \mathbf{\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}}$ **τελεστής χρόνου (ενέργειας)**

$\kappa\alpha\iota \quad \frac{\partial\psi}{\partial x} = i\frac{p}{\hbar}e^{i(px-Et)/\hbar} = i\frac{p}{\hbar}\psi \quad (\mathbf{3})$

δηλ. $\hat{\mathrm{p}} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}} = \mathrm{i}\frac{\hbar}{\mathrm{i}^2}\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}} \Rightarrow \mathbf{\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}}$ **τελεστής χώρου (ορμής)**

Οπότε οι **(2), (3)** παίρνουν την κομψή μορφή:

$$\hat{E}\psi = E\psi \quad \kappa\alpha\iota \quad \hat{p}\psi = p\psi$$

δηλαδή η δράση των τελεστών $\hat{E}$ και $\hat{p}$ πάνω στην κυματοσυνάρτηση $\psi(x,t)$ ξαναδίνει την κυματοσυνάρτηση πολλαπλασιασμένη με E και p αντίστοιχα.

Σχέση τελεστών για ελεύθερο σωματίδιο: $\hat{E} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Rightarrow \hat{E}\psi = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi$ **(4)**

αλλά ο τελεστής $\hat{p}^2 = \hat{p}\cdot\hat{p} = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\cdot\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) = i^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Οπότε *η* **(4)** δίνει: $\mathbf{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}}$ **ελεύθερη εξίσωση Schrödinger**

Στην περίπτωση που το σωματίδιο κινείται σε δυναμικό V(x) εισάγουμε τον τελεστή Hamilton:

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Οπότε: $$\widehat{H}\psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right)\psi \Rightarrow \widehat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi \Rightarrow$$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi$$ **χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrödinger**

Στις τρεις διαστάσεις είναι:

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + V(x,y,z)$$

$$\mu\varepsilon \quad \hat{p}_x \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

$$o\pi\acute{o}\tau\varepsilon \;\; \widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z) \Rightarrow \widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$$

Τρισδιάστατη εξίσωση Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \widehat{H}\psi \Rightarrow i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\psi$$

Συγγραφή – Επιμέλεια: Παναγιώτης Φ. Μοίρας