Schrödingerjeva enačba

Zakon gibanja je v kvantni mehaniki drugačen kot v klasični mehaniki. Namesto drugega Newtonovega zakona imamo časovno odvisno Schrödingerjevo enačbo

$$\hat{\mathrm{H}}\Psi(\vec{r},\mathrm{t}) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},\mathrm{t})}{\partial t}$$

ki nam določa časovne spremembe valovne funkcije. Časovna Schrödingerjeva enačba je parcialna diferencialna enačba s konstantnimi koeficienti. Rešitve iščemo v obliki ločljivih spremenljivk $\Psi(\vec{r},\mathrm{t}) = \psi(\vec{r})\phi(\mathrm{t})$, kjer je $\psi(\vec{r})$ krajevni del valovne funkcije in $\phi(\mathrm{t})$ časovni del. Za desno stran v Schrödingerjevi enačbi upoštevamo, da je krajevni del neodvisen od časa in dobimo

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},\mathrm{t})}{\partial t} = \mathrm{i}\hbar\psi(\vec{r})\frac{\partial\phi(\mathrm{t})}{\partial t}$$

Za levi del pa upoštevamo, da Hamiltonov operator deluje le na koordinate in ne na čas, tako da je časovni del valovne funkcije za Hamiltonov operator konstanta in pride pred operator ter dobimo

$$\hat{\mathrm{H}}\Psi(\vec{r},\mathrm{t}) = \phi(\mathrm{t})\hat{\mathrm{H}}\psi(\vec{r})$$

Časovno Schrödingerjevo enačbo sedaj zapišemo kot

$$\phi(\mathrm{t})\hat{\mathrm{H}}\psi(\vec{r}) = \mathrm{i}\hbar\psi(\vec{r})\frac{\partial\phi(\mathrm{t})}{\partial t}$$

in jo sedaj delimo za valovno funkcijo $\psi(\vec{r})\phi(\mathrm{t})$ ter dobimo

$$\frac{\phi(\mathrm{t})\hat{\mathrm{H}}\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})\phi(\mathrm{t})} = \frac{\mathrm{i}\hbar\psi(\vec{r})\frac{\partial\phi(\mathrm{t})}{\partial t}}{\psi(\vec{r})\phi(\mathrm{t})}$$

ki po krajšanju postane

$$\frac{\hat{\mathrm{H}}\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} = \frac{\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\phi(\mathrm{t})}{\partial t}}{\phi(\mathrm{t})}$$

Leva stran je sedaj funkcija le koordinat, desna pa le funkcija časa. Ta enačba je tako izpolnjena le v primeru, ko sta obe funkciji enaki isti konstanti in dobimo

$$\frac{\hat{\mathrm{H}}\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} = \mathrm{E}$$

ter

$$\frac{\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\phi(\mathrm{t})}{\partial t}}{\phi(\mathrm{t})} = E$$

E je separacijska konstanta. Prvo enačbo spremenimo v

$$\hat{\mathrm{H}}\psi(\vec{r}) = \mathrm{E}\psi(\vec{r})$$

in jo imenujemo stacionarna Schrödingerjeva enačba, katere rešitve so lastne funkcije ($\psi_n(\vec{r})$) in lastne energije (E_n) Hamiltonovega operatorja. Drugo enačbo sedaj zapišemo v obliki

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\phi_n(\mathrm{t})}{\partial t} = E_n\phi_n(\mathrm{t})$$

jo integriramo ter dobimo

$$\phi_n(\mathrm{t}) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

Sedaj izračunamo gostoto verjetnosti ρ za dobljeno stacionarno stanje $\Psi_n(\vec{r},\mathrm{t}) = \psi_n(\vec{r})\phi_n(\mathrm{t})$

$$\rho = |\Psi_n(\vec{r},\mathrm{t})|^2 = {\Psi_n}^*(\vec{r},\mathrm{t})\Psi_n(\vec{r},\mathrm{t}) = {\psi_n}^*(\vec{r}){\phi_n}^*(\mathrm{t})\psi_n(\vec{r})\phi_n(\mathrm{t}) = {\psi_n}^*(\vec{r})\psi_n(\vec{r})\phi_n(\mathrm{t}){\phi_n}^*(\mathrm{t})$$

Upoštevamo, da je prispevek h gostoti časovnega dela enak 1

$$\phi_n(\mathrm{t}){\phi_n}^*(\mathrm{t}) = e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = e^{\frac{i}{\hbar}E_n t-\frac{i}{\hbar}E_n t} = e^0 = 1$$

in za gostoto stacionarnega stanja dobimo, da je kar enaka absolutni vrednosti kvadrata krajevnega dela valovne funkcije

$$\rho = |\psi_n(\vec{r})|^2$$

Vidimo, da se gostota delcev v stacionarnem stanju s časom ne spreminja. Se pravi, kadar nas zanimajo samo stacionarna stanja, je dovolj, da rešimo le stacionarno Schrödingerjevo enačbo.