

## Matematické vyjádření Schrödingerovy rovnice

Hledání vlastních hodnot [energie](#) znamená řešit Schrödingerovu rovnici ve tvaru  $\hat{H}\psi = E\psi$ , kde  $\hat{H}$  je [hamiltonián](#) daného systému představující [celkovou energii](#) systému. Pokusíme se ho nyní odvodit na základě [postulátů kvantové mechaniky](#). Základem je vyjádřit všechny [veličiny](#) pomocí polohy nebo [hybnosti](#).

Operátor  $\hat{x}$  polohy je jednoduchý:  $\hat{x} = x$ , pro operátor hybnosti platí:  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ , tzn. že vektor hybnosti je možné psát ve tvaru:  $\vec{p} = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x}; \frac{\partial}{\partial y}; \frac{\partial}{\partial z} \right)$ . V uvedených vztazích představuje  $i$  imaginární jednotku a  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  redukovanou [Planckovu konstantu](#).

Symbol  $\frac{\partial f}{\partial x}$  značí tzv. parciální derivaci podle proměnné  $x$ . Je to podobný symbol jako symbol  $\frac{df}{dx}$ . Rozdíl je v tom, že symbol  $\frac{df}{dx}$  se používá u funkcí jedné proměnné, zatímco  $\frac{\partial f}{\partial x}$  se používá u funkcí více proměnných - tj. funkcí, které jsou závislé např. na  $x$  i na  $t$  (nebo na  $x, y, z$  i  $t$  - jako např. [vlnová funkce](#)).

Skutečnost, že ve vztahu pro  $x$ -ovou složku hybnosti vystupuje tento symbol bez udané funkce je v pořádku:  $\hat{p}_x$  je totiž operátor, který se bude teprve aplikovat na určitou funkci!

Pro výpočet hamiltoniánu systému si stačí uvědomit, že představuje celkovou energii systému, tj.  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$ , kde  $\hat{T}$  značí operátor [kinetické energie](#) a  $\hat{U}$  operátor [potenciální energie](#). Z klasické fyziky víme, že kinetickou energii  $E_k$  lze psát ve tvaru  $E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$ . Dosazením do hamiltoniánu a nahrazením operátorů hybnosti dostaneme:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \hat{U} = (-i\hbar)^2 \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \hat{U} = \frac{-\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \hat{U}.$$

Poslední úprava vyplývá z vlastností imaginární jednotky  $i$ :  $i^2 = (-i)^2 = -1$ .

Nyní je už možné řešit Schrödingerovu rovnici ve tvaru  $\hat{H}\psi = E\psi$ . Řešení zde nebudeme uvádět z několika důvodů:

1. Schrödingerova rovnice je parciální diferenciální rovnice, jejíž řešení je bez příslušné teorie z diferenciálního a integrálního počtu nemožné předvést;
2. postup řešení velmi silně závisí na tvaru hamiltoniánu daného systému;

Tj. půjde-li např. o jednorozměrný případ, třírozměrný případ, stav s nulovou [potenciální energií](#), stav s nenulovou potenciální energií, ...

3. plné řešení není pro další výklad nutné.

Zastavíme se pouze u následujícího aspektu Schrödingerovy rovnice. Podle konkrétního fyzikálního problému ([systému částic](#)) se může řešení výrazně zjednodušit. Obecná Schrödingerova rovnice je závislá jak na prostorových [souřadnicích](#), tak na čase. Tyto čtyři souřadnice (tři prostorové a jedna časová) vystupují jednak v hamiltoniánu daného systému a jednak ve vlnové funkci:  $\psi = \psi(x, y, z, t)$ . Tato vlnová funkce se bude tedy vyvíjet jak v čase, tak v prostoru. Popsat časovou změnu této funkce je možné pomocí derivace:  $\frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}$ .

Zápis  $\frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}$  znamená parciální derivaci funkce  $\psi = \psi(x, y, z, t)$  podle času.

Jiným způsobem je možné v rámci [kvantové mechaniky](#) popsat časovou změnu nějaké funkce pomocí operátoru časové změny (jednoho z postulátů kvantové mechaniky). Dostaneme tak:

$$\hat{L}\psi = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi(x, y, z, t). \text{ Právě jsme popsali dvěma různými způsoby časovou změnu funkce } \psi = \psi(x, y, z, t). \text{ Oba dva způsoby musí být ale identické, takže je možné psát:}$$
$$\frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi(x, y, z, t).$$

Při řešení této rovnice se většinou (pokud to fyzikální situace připouští) vyřeší problém v jednorozměrném případě (tedy v tom nejjednodušším) a teprve poté se zobecní (už analogickým postupem pouze náročnějším na zápis) do všech tří prostorových rozměrů.

Pokud se tedy omezíme na jednorozměrný případ s tím, že budeme řešit jen tzv. Schrödingerovu [časovou rovnici](#) (tj. bude nás zajímat pouze vývoj daného fyzikálního systému v závislosti na čase), pak jednoduchou matematickou úpravou dostaneme  $i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H(t)|\psi(t)\rangle$ . Tato rovnice patří mezi ta nejjednodušší vyjádření Schrödingerovy rovnice.

---

© **Encyklopedie Fyziky** (<http://fyzika.jreichl.com>); **Jaroslav Reichl, Martin Všeticka**

Licence <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/> zakazuje úpravy a komerční distribuci.