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: $\widehat{p_x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, 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: $\widehat{p_x}$ 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 $E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\left(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2\right) = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)$. Dosazením do hamiltoniánu a nahrazením operátorů hybnosti dostaneme: $\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\widehat{p_x^2} + \widehat{p_y^2} + \widehat{p_z^2}\right) + \hat{U} = \left(-i\hbar\right)^2\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \hat{U} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \hat{U}$.

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

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: $\hat{L}\psi = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi(x, y, z, t)$. Právě jsme popsali dvěma různými způsoby časovou změnu funkce $\psi = \psi(x, y, z, t)$. 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.
