

Matematické vyjádření Schrödingerovy rovnice

Hledání vlastních hodnot [energie](#) znamená řešit Schrödingerovu rovnici ve tvaru $\widehat{H}\psi = E\psi$, kde \widehat{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 \widehat{x} polohy je jednoduchý: $\widehat{x} = x$, 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. $\widehat{H} = \widehat{T} + \widehat{U}$, kde \widehat{T} značí operátor [kinetické energie](#) a \widehat{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:

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

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

Nyní je už možné řešit Schrödingerovu rovnici ve tvaru $\widehat{H}\psi = E\psi$. 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.