Уравнение Шредингера

Волновая функция, описывающая движение свободной частицы с заданным значением импульса p имеет вид волны де Бройля

$$\Psi(r,t) = A\exp[i(pr - Et)/\hbar]. \qquad (1)$$

Линейное дифференциальное уравнение, которому удовлетворяет волна де Бройля имеет вид

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}\right) \qquad (2)$$

В этом легко убедиться, продифференцировав (1) по координатам x, y, z и времени t.

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}Et$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)\Psi \qquad (3)$$

Для свободной частицы

$$\frac{\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)}{2m} = E \qquad (4)$$

соотношение (2) обычно записывается в виде

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi \qquad (5)$$

или

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \qquad (6)$$

где $\hat{H}$ - оператор Гамильтона.

Уравнение (6) называется уравнением Шредингера

Для свободной частицы

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = \frac{\hat{p}^2}{2m} \qquad (7)$$

Для частицы в потенциальном поле U(x,y,z)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x,y,z) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x,y,z) \qquad (8)$$