I.5.3. A Schrödinger-egyenlet

Szimbolikusan: $\boxed{\hat{H}\psi_i = E_i\psi_i}$

Itt $\hat{H}$ a „Hamilton-operátor", mely a klasszikus fizikai energiafüggvény megfelelője. Alapvetően két tagból áll, a kinetikus és a potenciális energiát leíró tagból. (a szimbolikus egyenlet részletesen kiírva egy *differenciálegyenlet.*)

ψ_i a rendszer i-edik stacionárius állapotát leíró „hullámfüggvény", E_i az energia. Az *i* index azt mutatja, hogy az egyenletnek általában *diszkrét* megoldásai vannak – ebben fejeződik ki a kísérletleg megfigyelt *kvantáltság.*

ψ_i ma elfogadott értelmezése: a hullámfüggvény négyzetének értéke a tér egy adott pontjában az elektron tartózkodási valószínűségét adja meg. Csak a VALÓSZÍNŰSÉG definiálható, az elektron pályája (mozgása) NEM követhető a klasszikus fizikában (pl. a bolygóknál)megszokott módon.

[„Apróbetűs" megj.:Schrödinger „heurisztikus" gondolatmenete az optika klasszikus alapegyenletével indít. Tekintsünk 1-dimenziós mozgást, az ezt leíró függvény legyen f(x,y,x,t); az alapegyenlet:

$$\partial^2 f/\partial x^2 + \partial^2 f/\partial y^2 + \partial^2 f/\partial z^2 = c^{-2}\, \partial^2 f/\partial t^2 \quad (1)$$

Egy *partikuláris* megoldás:
$f = \psi(x)\, e^{i\varpi t}$; ezt (1)-be írva:

$$e^{i\varpi t} d^2\psi/dx^2 = c^{-2}\, (-\omega)^2\, e^{i\varpi t}\, \psi(x)$$

de Broglie nyomán, a hullámhossz: $\lambda = h/p$
Jelölés: $\hbar = h/2\pi$
Igy: $d^2\psi/dx^2 = -(4\pi^2 p^2/h^2)\psi = -(p^2/\hbar^2)\psi$

$-(\hbar^2/2m_e)\, d^2\psi/dx^2 = (p^2/2m_e)\,\psi$;
$p^2/2m_e = E_K$(kin.en.) $= E - V$ megj. vége]

A Schrödinger-egyenlet 1-dimenziós mozgásra:

$$-(\hbar^2/2m)\, d^2\psi/dx^2 + V\psi = E\,\psi$$

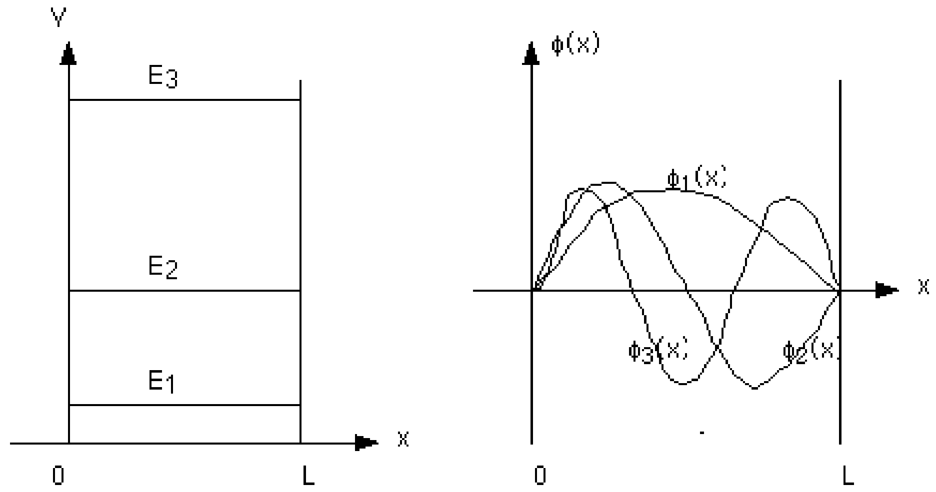
az első tag a kinetikus energiát, a második a potenciális energiát írja le.

Modell-példa: a *potenciáldoboz*

$V(x) = +\infty$, ha $x \le 0$, vagy $x \ge L$,
$V(x) = 0$, ha $0 < x < L$.
Tehát csak kinetikus (mozgási) energia van, így:
$-\hbar^2/2m_e\, d^2\psi/dx^2 = E\psi$
Peremfeltétel: a falnál ψ zérusba megy;
megoldások, *n* kvantumszám. szerint:

Energiák: $E_n = n^2 (h^2/8m_eL^2)$ { $E_n = const^{x} n^2$}

és a hullámfüggvények $\psi_n(x) = A \sin(n\pi x/L)$.



Ábra: az 1-dim. potenciáldoboz (-völgy): energiák és állapotfüggvények

Megj.: látjuk, hogy a legalacsonyabb energia SEM zérus, a rendszer <u>alap</u>állapotában is van valamennyi kinetikus energia: ez a „zéruspontenergia" !