Schrödingerova jednadžba

. . . osnovna jednadžba kvantne fizike
. . . nerelativistička

$$1\text{D} : \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}}$$

V . . . potencijal

m . . . masa čestice opisane valnom funkcijom Ψ

$$3\text{D} : \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}}$$

∇ . . . ”nabla” operator

$\nabla^2 = \Delta$ . . . Laplace-ov operator

Kartezijeve koordinate: $\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Sferne koordinate: $r = |\vec{r}|$, $\vartheta = \sphericalangle(\vec{r}, +z$ os), $\varphi = \sphericalangle(r_{xy}, +x$ os)

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{1}{sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r = \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}$$

Ψ . . . valna funkcija

$\boxed{P = \Psi^*\Psi = |\Psi|^2}$ . . . gustoća vjerojatnosti

$\boxed{P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx}$ . . . vjerojatnost da se u trenutku t čestica nađe u intervalu $(x, x+dx)$ (analogno za 3D)

$\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2dx < \infty$ . . . vrijedi za vezana stanja,

$\int_a^b|\Psi|^2dx < \infty$ . . . vrijedi za ne-vezana stanja

$\boxed{\int_V |\Psi|^2dV}$ . . . vjerojatnost pronalaženja čestice u volumenu V

$\boxed{\int_V |\Psi|^2dV = 1}$ . . . vrijedi ukoliko je čestica sigurno u volumenu V te može poslužiti za normalizaciju valne funkcije

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dx\,dy\,dz = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} sin\vartheta d\vartheta \int_0^{\infty} r^2\,dr$$

Vremenski neovisna Schrödingerova jednadžba

(1D)

$V(x,t) = V(x)$

$$\boxed{\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)}$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t} = E\varphi(t)\,, \qquad \varphi(t) = e^{-iE/\hbar t}}$$

$$\boxed{\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iE/\hbar t} = \psi(x)e^{-i\omega t}}\,,\ E = \hbar\omega$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)}$$

(analogno za 3D)

$$\boxed{\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-iE/\hbar t} = \psi(\vec{r})e^{-i\omega t}}$$ itd.

Uvjeti da rješenje Schrödingerove jednadžbe ima smisla:

$\psi(x), \dfrac{d\psi}{dx}$: konačne, jednoznačne i neprekidne funkcije

Operatori

(1D zapis)

$\boxed{\hat{x} = x}$ ... položaj, $\boxed{\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}}$ ... impuls, $\boxed{\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}}$ ... energija,

$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V}$ ... Hamiltonijan

Očekivana (srednja) vrijednost fizikalne veličine F kojoj odgovara operator $\hat{F}$

$$\boxed{\overline{F(x,p,t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi * (x,t)\, \hat{F}(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, t)\, \Psi(x,t)dx = \langle \Psi | F \Psi \rangle}$$

Neodređenost (srednje odstupanje od srednje vrijednosti) fizikalne veličine F

$$\boxed{(\Delta F(x,p,t))^2 = \overline{\left(F(x,p,t) - \overline{F(x,p,t)}\right)^2} = \overline{F^2(x,p,t)} - \overline{F(x,p,t)}^2}$$

npr. $(\Delta x)^2 = \overline{(x - \overline{x})^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2$

Fizikalna veličina $F \rightarrow$ operator $\hat{F}$

$$\boxed{\hat{F}\psi_n = f_n \psi_n}$$

ψ_n ... svojstveno stanje (koje odgovara kvantnom broju n)

f_n ... svojstvena vrijednost

Princip superpozicije

Proizvoljno kvantno stanje Ψ se može prikazati kao superpozicija svojstvenih stanja ψ_n neke fizikalne opservable F.

1D:

$$\boxed{\Psi(x,t) = \Sigma_n\, b_n(t)\psi_n(x)}$$

$$\boxed{b_n(t) = \int \psi_n^*(x)\Psi(x,t)dx = \langle \psi_n | \Psi \rangle}$$

za slučaj vremenski neovisne Schrödingerove jedndžbe ($V \neq f(t)$):

$b_n(t) = b_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = b_n e^{-i\omega_n t}$

Vjerojatnost da mjerenje opservable F nađe n-tu svojstvenu vrijednost f_n:

$$\boxed{P(f_n) = |b_n(t)|^2 \frac{\langle \psi_n | \psi_n \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}}$$

za $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$ i $\langle \Psi | \Psi \rangle$ (stanja normalizirana na 1):

$$\boxed{P(f_n) = |b_n(t)|^2}$$

Matematički formalizam

Neka svojstva operatora:

- $\hat{A}(f+g) = \hat{A}f + \hat{A}g$ linearni operatori
- $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ komutator

$$\boxed{[\hat{A}, \hat{B}] = 0}$$ kompatibilni operatori

(odgovarajuće fizikalne veličine mogu biti istovremeno mjerene)

$$\boxed{\Delta A \, \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|}$$ komutatorski teorem

- $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ hermitski operatori