Schrödingerova rovnice

Obecný stavový vektor

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, a(p)\, |p\rangle$$

V souřadnicové reprezentaci

$$\langle x|\psi\rangle \equiv \underline{\psi(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, a(p)\, \langle x|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, a(p) \frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

Ve 3D:

$$\psi(x,y,z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x\, dp_y\, dp_z}{(2\pi\hbar)^3}\, a(p_x,p_y,p_z)\, e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)}$$

Důležitý problém KM $\Rightarrow$ <u>operátor energie</u>

Umíme napsat:

$\boxed{\text{ověřte!}}$

$$\hat{T}_x = \int dp \frac{p_x^2}{2m} |p_x\rangle\langle p_x| \Rightarrow \underset{x\text{-reprezentaci}}{\hat{T}_x} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

Vlastní stavy operátoru kinetické energie:

$$\hat{T}|p_x\rangle = \frac{p_x^2}{2m}|p_x\rangle$$

Operátor celkové energie:

$$\hat{E} = \hat{T} + \hat{V}$$

operátor potenciální energie

Máme stavy $|q\rangle$. Tomuto stavu přiřadíme hodnotu potenciální energie $V(q)$

$$\Rightarrow \quad \hat{V} = \int dq\, V(q)\, |q\rangle\langle q|$$

$$\Rightarrow \quad \hat{E} = \int dp\, \frac{p^2}{2m} |p\rangle\langle p| + \int dq\, V(q)\, |q\rangle\langle q|$$

Poznámka:

Ve staré QM se kvantovala akce

$$\int p\, dq = n\hbar$$

$$[\hat{p}, \hat{q}] = -i\hbar$$

q souřadnice $\longrightarrow$ kanonicky sdružený impuls p

$\hat{E}(\hat{q}, \hat{p}) \longleftarrow$ Hamiltonián

$$\boxed{\text{Operátor energie} = \text{Hamiltonián}}$$

$$\hat{H} \equiv \hat{E}$$

$$\boxed{\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}}$$

určit energetické spektrum: možné (diskrétní) hodnoty energie

$$\boxed{\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle}$$

Schrödingerova rovnice

(stacionární; bezčasová Sch. r.)