Schrödingerjeva enačba

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$ - v kv. meh. ustrezajoča 2. Newt. zakonu

$\Psi_n \Rightarrow \quad \hat{H}\Psi_n = i\hbar\frac{\partial\Psi_n}{\partial t}$

$\Psi_m \Rightarrow \quad \hat{H}\Psi_m = i\hbar\frac{\partial\Psi_m}{\partial t}$

$$\Psi = a\Psi_n + b\Psi_m$$ NAČELO SUPERPOZICIJE

Ψ... valovna funkcija našega sistema

$$|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi = \rho$$ VERJETNOSTNA GOSTOTA, KJER SE KV. DELEC NAHAJA

IMAGINARNA ŠT.

$z = x + iy$

$\bar{z} = z^* = x - iy \Rightarrow \quad z^*z = |z|^2 = x^2 + y^2$

↳ v MAT mora biti funkcija zvezna, njen odvod zvezen in enolična ter v kvadratu INTEGRABILNA (integral mora biti končen)

$$\Psi = \Psi(x,y,z,t) = \Psi(x,y,z)\,\phi(t)$$

$$\hat{H}\Psi = \hat{H}\Psi\phi = \phi\,\hat{H}\Psi$$

↳ odvod po x,y,z; ϕ je konst.

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\partial(\Psi\phi)}{\partial t} = \Psi\phi'$$

$$\phi\,\hat{H}\Psi = i\hbar\Psi\phi' \quad /:\Psi\phi$$

$$\frac{\phi\hat{H}\Psi}{\Psi\phi} = i\hbar\frac{\Psi\phi'}{\Psi\phi}$$

$$\frac{\hat{H}\Psi}{\Psi} = i\hbar\frac{\phi'}{\phi} = E$$

E = konst.

$$\frac{\hat{H}\Psi}{\Psi} = E \quad /\Psi$$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

stacionarna Sch. enačba

$$i\hbar\frac{\phi'}{\phi} = E$$

$$i\hbar\phi' = E\phi \quad /: i\hbar$$

$$\phi' = \frac{E\phi}{i\hbar}$$

$$\phi' = \frac{-Ei}{\hbar}\phi$$, saj je $\phi' = \frac{d\phi}{dt} \Rightarrow$

$$\Rightarrow \phi = e^{\frac{-iE}{\hbar}t}$$

rešitev čas. dela Sch. enačbe

$\hat{H}\psi = E\psi$ – iskanje lastnih funkcij in lastnih vrednosti

$\Downarrow$

ψ_n, E_n – neskončno funkcij in neskončno vrednosti energij

$\phi_n = e^{\frac{-iE_n}{\hbar}t}$ – za vsako funkcijo tudi čas. del

$$\Psi_n = \psi_n \phi_n = \psi_n e^{\frac{-iE_n}{\hbar}t}$$

$$\rho_n = |\psi_n|^2 = \psi_n^* \psi_n = \psi_n^* e^{\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_n e^{\frac{-iE_n}{\hbar}t} = |\psi_n|^2 \cdot 1 = |\psi_n|^2$$

$\psi_n^* = \psi_n^* e^{\frac{iE_n}{\hbar}t}$

gostota delcev za Sch. enačbo v stac. stanju je ENAKA

Če nas zanima struktura neke molekule $\Rightarrow$ rešimo stac. Sch. enačbo !!

veliki Ψ_n ... čas. odvisnost,
mali ψ_n ... stac. del

Naša baza je ORTOGONALNA - funkcija(e) so $\perp$ ena na drugo:

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int \psi_n^* \psi_m \, dV = 0, \quad m \neq n$$

$n = m$:

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int \psi_n^* \psi_n dV = \int |\psi_n|^2 dV = N^2$$

$$\frac{\langle \psi_n | \psi_n \rangle}{N^2} = 1 \Rightarrow \left\langle \frac{\psi_n}{N} \middle| \frac{\psi_n}{N} \right\rangle = 1$$

normirana val. funkcija ~ enotski vektor (pri vektorjih)

$$\langle \hat{p}_x \rangle = \langle \psi_n | \hat{p}_x | \psi_n \rangle = \int \psi_n^* \hat{p}_x \psi_n dV$$

pov. vrednost gib. količine

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \psi_n | \hat{x} | \psi_n \rangle = \int \psi_n^* \hat{x} \psi_n dV = \int \psi_n^* x \psi_n dV = \int x \psi_n^* \psi_n dV =$$

pov. vrednost koordinate $= \int x |\psi_n|^2 dV$

$dV = dx\,dy\,dz$