Χρονικώς ἐξηρτημένη ἐξίσωσις Schrödinger

Ἡ ἐξ. (17) εἶναι ἡ χρονικώς ἐξηρτημένη ἐξίσωσις Schrödinger

$$\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad (17)$$

ὅπου "x" εἶναι μία ἢ περισσότερες ἀνεξάρτητες μεταβλητές καί

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

Θεωροῦμε τό $\hat{V}$ ὡς χρονικώς ἀνεξάρτητο

«Δοκιμάζουμε» τήν λύση $\Psi(x,t) = \psi(x) f(t)$ (28)

→Ἀντικαθιστοῦμε τήν (28) στήν (17) κι ἔχουμε:

$f(t)\hat{H}\psi(x) = i\hbar\psi(x)\frac{df}{dt}$ διότι ἡ $\hat{H}$ εἶναι χρονικώς ἀνεξάρτητος

Διαιροῦμε καί τά δύο μέλη τῆς προηγουμένης ἐξισώσεως μέ τήν $\Psi(x,t) = \psi(x) f(t) \neq 0$.

$$\frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)} = i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{df}{dt} \qquad (29)$$

Τό ἀριστερό μέρος τῆς (29) εἶναι συνάρτησις μόνον τῆς μεταβλητῆς x (ἢ μόνον μεταβλητῶν χώρου), τό δέ δεξιό μόνον τοῦ χρόνου t. Οἱ μεταβληταί x καί t εἶναι ἀνεξάρτητες μεταβληταί, ἄρα γιά νά ἰσχύει ἡ (29) κάθε μέλος της πρέπει νά ἰσοῦται μέ σταθερά:

$$\frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)} = i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{df}{dt} = E \qquad (30)$$

+ Σημειώσατε τήν διαφορά συμβολισμοῦ: $\Psi(x,t)$ καί $\psi(x)$

Ἡ E ἔχει διαστάσεις ἐνεργείας καί ἀντιπροσωπεύει τήν ὁλική ἐνέργεια τοῦ σωματιδίου. Ἄρα:

$$H\psi(x) = E\psi(x) \qquad (31)$$

καί

$$i\hbar \frac{1}{f(t)}\frac{df}{dt} = E \qquad (32)$$

Ἡ (31) εἶναι ἡ γνωστή μας πλέον χρονικῶς ἀνεξάρτητη ἐξίσωσις Schrödinger. Ἀπό τήν (32) ἔχουμε:

$$i\hbar \frac{d\ln f(t)}{dt} = E \Rightarrow f(t) = f(0)e^{-iEt/\hbar}$$

Ὁρίζοντες τήν ποσότητα

$$\omega \equiv \frac{E}{\hbar}, \text{ ἄρα} \qquad (33)$$

$$f(t) = f(0)e^{-i\omega t}, \; f(t=0) = f(0) \qquad (34)$$

Ἡ σταθερά $f(0)$ δίχως βλάβη τῆς γενικότητος μποροῦμε νά ἐπιλέξουμε ἴση μέ τήν μονάδα, ἄρα

$$f(t) = e^{-i\omega t} \qquad (34\alpha)$$

Ἄρα ἡ πλήρης συνάρτησις εἶναι

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\omega t} \qquad (35)$$

Γιά τό φρέαρ δυναμικοῦ ἀπείρων τοιχωμάτων π.χ. ἔχουμε

$$\Psi_N(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{N\pi}{L}x\, e^{-i\omega_N t}$$

ὅπου $\omega_N = \frac{E_N}{\hbar} = \frac{N^2 h^2}{8mL^2\hbar} \left(= \frac{E_1}{\hbar}N^2 = \omega_1 N^2\right)$

(βλ. ἐξ. (15))

Σύμφωνα μέ τήν συνθήκη ὑπάρξεως τοῦ ὁλοκληρώματος κανονικοποιήσεως (συνθήκη i, σελ. 13) πρέπει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \rho(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x)\, e^{i\omega^* t}\, \Psi(x)\, e^{-i\omega t} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\Psi(x,t)|^2\, e^{i(\omega^*-\omega)t} = 1$$

Δεχόμενοι ὅτι ἡ E εἶναι πραγματικός ἀριθμός ἤ ὅτι τό ὁλοκλήρωμα εἶναι χρονικῶς ἀνεξάρτητο, $\omega^*=\omega$ ἤ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\Psi(x)|^2 = 1$$

Ἐπίσης ἡ πιθανοτική πυκνότης γιά συναρτήσεις τῆς μορφῆς (35) γράφεται

$$\rho(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = |\Psi(x)|^2 = \rho(x,0)$$

Συναρτήσεις τῆς μορφῆς αὐτῆς, δηλ. $\Psi_j(x,t) = \psi_j(x)e^{-iE_jt/\hbar}$ ὅπου E_j ἰδιοτιμή τῆς (31) καλοῦνται στάσιμες καταστάσεις (περιγράφουν στάσιμες καταστάσεις), ὄχι διότι ἡ συνάρτηση εἶναι χρονικῶς ἀνεξάρτητη, ἀφοῦ εἶναι χρονικῶς ἐξαρτημένη, ἀλλά διότι ἡ πιθανοτική πυκνότης εἶναι χρονικῶς ἀνεξάρτητη.

Τώρα ἡ γενική λύσις τῆς χρονικῶς ἐξαρτημένης ἐξισώσεως Schrödinger, ἐξ. (17) δίνεται ἀπό

$$\Psi(x,t) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \psi_j(x) e^{-iE_jt/\hbar} \qquad (36)$$

Πράγματι ἀντικαθιστῶντας τήν (36) στήν (17) καί χρησιμοποιῶντας τήν $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$ (οἱ συντελεστές $\{c_j\}$ εἶναι σταθεροί) ἔχουμε

$$\hat{H}\Psi(x,t) = \hat{H}\sum_{j=1}^{\infty} c_j \psi_j(x) e^{-iE_jt/\hbar} = \sum_{j=1}^{\infty} c_j e^{-iE_jt/\hbar}\hat{H}\psi_j$$

Η $\hat{\mathcal{H}}\Psi(x,t) = \sum_j c_j e^{-iE_jt/\hbar} E_j \psi_j$ (37)

Επίσης, $i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = i\hbar \sum_{j=1}^{\infty} c_j \psi_j(x) \frac{d}{dt} e^{-iE_jt/\hbar} =$

$$= \sum_{j=1}^{\infty} (i\hbar)\, c_j \psi_j(x) (-iE_j/\hbar)\, e^{-iE_jt/\hbar} = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \psi_j E_j e^{-iE_jt/\hbar}$$

Η τελευταία σχέση όμως είναι η ίδια με την (37), άρα η (36) ικανοποιεί την (17) για τον λόγο αυτό η (36) καλείται και γενική λύσις της εξισώσεως Schrödinger (της χρονικώς εξαρτημένης).
Ας εξετάσουμε την πιθανοτική πυκνότητα συναρτήσεως του τύπου (36). Η απλούστερη περίπτωσις είναι

$$\Psi(x,t) = c_1\psi_1 e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2 e^{-iE_2t/\hbar} \qquad (38)$$

και

$$|\Psi(x,t)|^2 \equiv \Psi(x,t)\Psi(x,t)^* =$$

$$|c_1\psi_1(x)|^2 + |c_2\psi_2(x)|^2 + c_1^* c_2 \psi_1^*(x)\psi_2(x) e^{i(\omega_1-\omega_2)t} + c_2^* c_1 \psi_1(x)\psi_2^*(x) e^{-i(\omega_1-\omega_2)t} \qquad (39)$$

Η (39) είναι προφανώς χρονικώς εξαρτημένη λόγω του 3ου όρου του 2ου μέλους. Η εξ. (38) δεν περιγράφει στάσιμο κατάσταση (και κατ' επέκτασιν βέβαια το ίδιο ισχύει για την (36)), αλλά περιγράφει την "δυναμική" συνύπαρξη δύο καταστάσεων, της 1 και 2.
Ποιά είναι η "φυσική" σημασία των συντελεστών $\{c_j\}_j$; Από την γενική λύση (36) και σε χρόνο $t=0$ (δηλ. όταν ξεκινά η «δημιουργία» του συστήματος)

Παίρνουμε:

$$\Psi(x,0) = \sum_j c_j \varphi_j(x) \qquad (40)$$

Θεωρούμε την $\Psi(x,0)$ ως την "αρχική" κατάσταση του συστήματος. Πολλαπλασιάζουμε την (40) επί $\varphi_i^*(x)$ και ολοκληρώνουμε στον αντίστοιχο χώρο

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi_i^*(x)\,\Psi(x,0) = \sum_j c_j \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi_i^*(x)\,\varphi_j(x)$$

Επειδή οι συναρτήσεις $\{\varphi_j\}_{j=1}^{\infty}$ είναι ιδιοσυναρτήσεις της H, νωρίτερα θα δείξουμε ότι

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi_i^*(x)\,\varphi_j = \delta_{ij}, \quad \text{άρα}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi_i^*(x)\,\Psi(x,0) = \sum_j c_j \delta_{ij} = c_i.$$

Ή ότι οι σταθερές $\{c_j\}_j$ οι οποίες υπεισέρχονται στην (36) δίνονται από

$$c_i = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi_i^*(x)\,\Psi(x,0) \qquad (41)$$

Οι συντελεστές δηλ. $\{c_j\}_j$ καθορίζονται πλήρως από μια δοθείσα η "αρχική κατάσταση" του προβλήματος και ο τύπος $\{\varphi_j\}$.