ΕΞΙΣΩΣΙΣ SCHRÖDINGER

"Ἔστω" μηχανικό" σύστημα ὁλικῆς ἐνεργείας $E =$ σταθερά.
Δεχόμεθα ὅτι

$$E = T + V \qquad (1)$$

ὅπου T ἡ κινητική καί V ἡ δυναμική ἐνέργεια τοῦ συστήματος. Π.χ. γιά ἕνα σωματίδιο τό ὁποῖο κινεῖται ἐπί μιᾶς διαστάσεως $T = p_x^2/2m$ ὅπου p_x ἡ ὁρμή κατά μῆκος τοῦ καρτεσιανοῦ ἄξονος x καί m ἡ μᾶζα. Σέ τρεῖς διαστάσεις $T = p^2/2m$ ὅπου $p^2 = \vec{p}\cdot\vec{p} = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ καί $p = +(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2}$ τό μέτρο τῆς γραμμικῆς ὁρμῆς $\vec{p}$.
Ἡ συνάρτησις δυναμικῆς ἐνεργείας εἶναι $V(x)$, $V(\vec{r})$ σέ μία καί σέ τρεῖς διαστάσεις ἀντιστοίχως. Πρός τό παρόν, οἱ συναρτήσεις δυναμικῆς ἐνεργείας οἱ ὁποῖες θά χρησιμοποιηθοῦν θά εἶναι χρονικῶς ἀνεξάρτητες. "Ἔχουμε λοιπόν

σέ μία διάσταση γιά ἕνα σωματίδιο $\quad E = \dfrac{p_x^2}{2m} + V(x) \qquad (2)$

σέ τρεῖς διαστάσεις " $\quad E = \dfrac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \qquad (3)$

σέ τρεῖς διαστάσεις, N σωματίδια $\quad E = \sum_{j=1}^{N} \dfrac{p_j^2}{2m_j} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_N) \qquad (4)$

Ἡ προηγούμενη διατύπωση τῆς ἐνεργείας εἶναι κλασσική. Γιά νά μεταβοῦμε στήν κβαντική περιγραφή ἀντικαθιστοῦμε τίς γραμμικές ὁρμές $\vec{p}$ μέ τόν τελεστή τῆς ὁρμῆς:

$$p_x \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \qquad (5)$$

$$\vec{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla \qquad (5')$$

ὅπου $\hbar \equiv h/2\pi$ καί h ἡ σταθερά τοῦ planck
$(\hbar = 1.0545887(57)\times 10^{-27}\,\mathrm{erg\,s} = 6.582173(17)\times 10^{-22}\,\mathrm{MeV/s})$

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

Ἡ ὁλική ἐνέργεια τοῦ συστήματος E μέ τήν προηγούμενη ἀντικατάσταση μετατρέπεται σέ τελεστή, συμβολίζεται μέ $\hat{\mathcal{H}}$ καί ὀνομάζεται Χαμιλτονιανή. Ἄρα σέ μία διάσταση καί ἕνα σωματίδιο

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \qquad (6)$$

σέ τρεῖς διαστάσεις

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \qquad (6')$$

Χρησιμοποιώντας τήν (4) καί τόν "κανόνα" (5') ἡ Χαμιλτονιανή συστήματος πολλῶν σωματιδίων (N) καί στόν τρισδιάστατο χῶρο γράφεται

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^{N} -\frac{\hbar^2}{2m_j}\nabla^2(j) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_N) \qquad (7)$$

Ἡ χρονικῶς ἀνεξάρτητης ἐξίσωσης Schrödinger εἶναι

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_N) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_N) \qquad (8)$$

ὅπου Ψ ἡ "κυματοσυνάρτηση" ἡ ὁποία "περιγράφει" πλήρως τό σύστημα. Ἀναλυτικότερα ἡ (8) γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \qquad (9)$$

ἢ γιά περισσότερα τοῦ ἑνός σωματίδια

$$\left(\sum_{j=1} -\hbar^2/2m_j\,\nabla^2(j) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_N)\right)\Psi = E\Psi \qquad (10)$$

Ἡ ἐξίσωσις Schrödinger (8, 10) δὲν εἶναι παρά διαφορική ἐξίσωσις μερικῶν παραγώγων, γραμμική καί 2ας τάξεως. Ἡ λύσις τοῦ ἑκάστοτε μαθηματικοῦ-φυσικοῦ προβλήματος ἐπικεντρώνεται πλέον στήν λύση τῆς ἐξισώσεως Schrödinger δηλ. στόν προσδιορισμό τῆς Ψ, ἡ ὁποία ἐγκλείει ὅλη τήν δυνατή πληροφορία τοῦ πρός ἐξέτασιν συστήματος. Τό πῶς θά ἐξάγουμε τήν πληροφορία αὐτή ἐάν ἡ Ψ εἶναι γνωστή θά τό δοῦμε ἀργότερα. Ἐπίσης ἀργότερα θά ἐκθέσουμε τούς γενικούς περιορισμούς, μαθηματικούς-φυσικούς ἐπί τῆς Ψ καθώς καί τήν φυσική της σημασία. Πρός στιγμήν θά ἐξετάσουμε ἕνα ἀπό τά ἁπλούστερα προβλήματα, ὅπου σωματίδιο μάζης m (π.χ. e, p, n, ...) κινεῖται ἐντός φρέατος δυναμικοῦ V = σταθερό, "ἀπείρων τοιχωμάτων" καί ὡρισμένου μήκους.