Уравнение Шредингера

Если не следовать примеру ряда теорфизических курсов и не проливать на предмет слишком много тьмы, суть процесса сводится к дифференциальной экзекуции (действию операторов) над ψ-функцией нерелятивистской системы, извлекающей из нее классическое энергетическое соотношение. Ее вполне достаточно продемонстрировать на примере одной частицы. Как известно, волна де Бройля $\psi(\vec{r},t)$ задается в этом случае соотношением:

$$\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)}, \tag{1}$$

из которого надо извлечь

$$\frac{p^2}{2m} + U = E, \tag{2}$$

где p, U, E — соответственно, импульс, потенциальная и полная энергия нерелятивистской частицы. Под потенциальной энергией здесь понимается энергия во внешнем поле, поэтому энергия покоя частицы mc^2 в (2) не входит. Но она нам и не нужна, поскольку уравнение Шредингера не претендует на описание взаимных превращений частиц, то есть энергия покоя, будучи включенной в (2), была бы симметричной, а следовательно, сокращаемой добавкой в обеих его частях.

Итак:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \psi\frac{i}{\hbar}p_x.$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\psi\frac{p_x^2}{\hbar^2},$$

откуда

$$p_x^2\psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}. \tag{3}$$

Аналогично

$$p_y^2\psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} \tag{4}$$

$$p_z^2\psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}. \tag{5}$$

Далее

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\psi\frac{i}{\hbar}E,$$

откуда

$$E\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{6}$$

Подставляя (3), (4), (5), (6) в (2), получаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+U\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

Или в более лаконичном виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\partial_x^2\psi+\partial_y^2\psi+\partial_z^2\psi\right)+U\psi=i\hbar\partial_t\psi. \tag{7}$$

Или в еще более лаконичном виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+U\psi=i\hbar\partial_t\psi, \tag{8}$$

где

$$\Delta=\nabla^2=\partial_x^2+\partial_y^2+\partial_z^2 \tag{9}$$

— оператор Лапласа. Или в еще более лаконичном виде:

$$\hat{H}\psi=\hat{E}\psi, \tag{10}$$

где

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U \tag{11}$$

— оператор Гамильтона (гамильтониан),

$$\hat{E}=i\hbar\partial_t$$

— оператор энергии. То есть фактически мы написали энергию и справа, и слева, но сделали это различными способами, поэтому и получили в итоге нетривиальное уравнение — уравнение Шредингера.