

Schrödingerova rovnice

Schrödingerova rovnice je matematická rovnice popisující kvantový systém, např. elektron v atomu.

V klasickém (makroskopickém) světě používáme pro popis pohybu těles klasickou mechaniku, založenou na Newtonových zákonech. Pro popis mikroskopického světa však nutno použít kvantovou mechaniku. Schrödingerova rovnice má v kvantové mechanice obdobnou roli jako Newtonův druhý zákon v klasické mechanice. Řešením Schrödingerovy rovnice je **vlnová funkce** (*wave function*) ψ (psi), která plně charakterizuje kvantový systém.

V některých případech (např. při zkoumání stavby atomů) nás nezajímá časový vývoj systému, jen jeho stacionární stav. Pak používáme tzv. **stacionární (časově nezávislou, bezčasovou) Schrödingerovu rovnici** (*time-independent Schrödinger equation*), která má tvar:

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

kde \hat{H} je Hamiltonův operátor, který vyjadřuje celkovou energii systému, E je energie daného stavu.

Schrödingerova rovnice je nerelativistická, tedy uvažuje rychlost částic mnohem menší než rychlost světla ve vakuu (a všechno, co z toho plyne). Pro relativistický popis kvantových systémů slouží Klein-Gordonova rovnice.

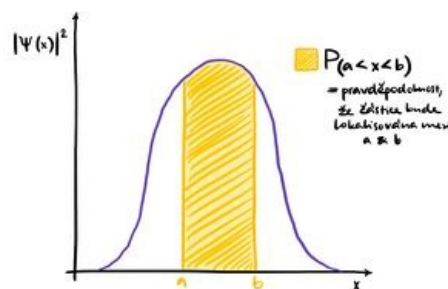
Význam vlnové funkce

V mikroskopickém světě není možné částici přesně lokalizovat v prostoru, neboť platí Heisenbergova relace neurčitosti. Lze u ní určit jenom pravděpodobnost **P** , že bude v nějaké části prostoru. *Vlnová funkce udává právě tuto pravděpodobnost*. Například pravděpodobnost, že částice v jednorozměrném prostoru bude lokalizovaná mezi body **a** a **b** je dána

$$P(a < x < b) = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx$$

Geometricky tedy plocha pod křivkou $|\psi(x)|^2$ odpovídá pravděpodobnosti výskytu částice (viz obrázek). Vlnová funkce je obecně komplexní funkce.

Vlnová funkce elektronu v atomu (v molekule) se nazývá atomový (molekulový) orbital.



Geometrické znázornění významu vlnové funkce