Varifrån kommer Schrödingerekvationen?

Utgå från (den klassiska) vågekvationen i en dimension:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}$$

där v är vågens hastighet. Ansätt $\varphi(x,t) = \psi(x)f(t)$, där den tidsberoende delen $f(t) = e^{i\omega t}$, sätt in i vågekvationen och separera variabler:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} f(t) = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 f(t)}{\partial t^2}\psi(x) \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} e^{i\omega t} = \frac{1}{v^2}(-\omega^2)e^{i\omega t}\psi(x) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{\omega^2}{v^2}\psi(x) \tag{1}$$

Den totala energin är

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{p^2}{2m} + V \Rightarrow p = \sqrt{2m(E-V)} \tag{2}$$

(2) insatt i de Broglies relation ger

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m(E-V)}}$$

Vi vet att $\omega = 2\pi\nu$, och $v = \nu\lambda$. Tillsammans med (2) ger detta

$$\frac{\omega^2}{v^2} = \frac{(2\pi\nu)^2}{(\nu\lambda)^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{4\pi^2 2m(E-V)}{h^2} \tag{3}$$

(3) insatt i (1) ger

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2 2m(E-V)}{h^2}\psi \Rightarrow -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = (E-V)\,\psi \tag{4}$$

Med hjälp av $\hbar = h/2\pi$ kan vi skriva om detta för att få *Schrödingerekvationen*:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right]\psi = E\psi$$

Uttrycket inom hakparentesen är operatorn för den totala energin, eller *Hamiltonianen*, $\hat{H}$, med vars hjälp Schrödingerekvationen kan skrivas

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