

Partikül Dalga Denklemi

Göresiz yani klasik enerjiye sahip serbest partikül dalgalarının sağladığı dalga denkleminin bir boyutlu şekli aşağıdaki gibi türetilmektedir.

Zamana bağlı Schrödinger dalga denklemleri

Dalga fonksiyonu

$$\Psi = A e^{(i/\hbar)(p x - Et)}$$

ve

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$$

ise dalga fonksiyonunun zamana göre birinci türevinden

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) (-E) \underbrace{A e^{(i/\hbar)(p x - Et)}}_{\Psi}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) (-E) \Psi$$

$$\Psi = -\frac{\hbar}{iE} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right)$$

dalga fonksiyonunun konuma göre ikinci türevinden

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 p^2 \underbrace{A e^{(i/\hbar)(p x - Et)}}_{\Psi}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 p^2 \Psi$$

$$\Psi = -\frac{\hbar^2}{p^2} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right)$$

Dalga fonksiyonları birbirine eşitlenirse

$$-\frac{\hbar}{iE} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right) = -\frac{\hbar^2}{p^2} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right)$$

Enerji yerine yazılırsa

$$-\frac{2m\hbar}{ip^2} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{p^2} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right)$$

Denklemin son hali aşağıdaki gibi olur.

$$i\hbar \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) = 0$$

Zamana bağlı Schrödinger dalga denkleminin üç boyutlu hali doğrudan aşağıdaki gibi yazılabilmektedir.

$$i\hbar \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla^2 \Psi = 0$$

Zamandan bağımsız Schrödinger dalga denklemleri

Dalga fonksiyonunun zamana göre birinci türevinden yazılan

$$E\Psi = -\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)$$

Eşitliği sağdan Ψ^{-1} ile çarpılarak enerji operatörü aşağıdaki gibi elde edilir.

$$E = -\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)$$

Bu eşitlik ile $\Psi \equiv \Psi(x, t) \equiv \Psi(x)\Psi(t) \equiv \Psi \Psi(t)$ eşitliği zamana bağlı Schrödinger denkleminde yerine yazıldıktan sonra soldan $\Psi(t)^{-1}$ ile çarpılarak serbest partiküller için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi bir boyut için

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) + E \Psi = 0$$

Üç boyut için

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla^2 + E \Psi = 0$$

Şeklinde elde edilir.