

## C5.1 Ecuația Schrödinger

Se porneste de la operatorii cuantici ai energiei și impulsului

$$\hat{E}\bullet = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \bullet,$$

$$\hat{p}_x \bullet = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \bullet$$

Când mișcarea (electronică) este descrisă de un potențial, să spunem  $V(\mathbf{r})$ , operatorii de energie și impuls se pot considera în ecuația energiei totale

$$E \cong V(\mathbf{r}) + \frac{p^2}{2m_0}$$

Acum, trecând ultima expresie în registrul operatorilor, prin aplicarea definițiilor operatorilor pentru energie și impuls asupra funcției de undă obținem ecuația Schrödinger temporală

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_i(\mathbf{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r})$$

unde, s-a introdus operatorul Laplacian cu forma

$$\nabla^2 = \partial_i \partial^i, \quad \partial^i = \partial / \partial x_i, \quad i = \overline{1,3}$$

Această ecuație stă la baza fenomenelor nerelativiste cuantice în care este implicat electronul, în atomi, molecule, corp solid.