$$M(x) = \int_{\infty}^{+\infty} xf(x)dx\,. \qquad \text{(D-8.4.18)}$$

Rasturanje eksperimentalnih podataka oko srednje vrednosti (aritmetičke sredine) karakteriše se *disperzijom D*. Za diskretnu slučajnu veličinu:

$$D = \sum_{i=1}^{m}(x_i - \langle x\rangle)^2 f_i\,. \qquad \text{(D-8.4.19)}$$

Kada $n \to \infty$:

$$D = \sum_{i}(x_i - M)^2 p_i\,. \qquad \text{(D-8.4.20)}$$

Za kontinualnu slučajnu veličinu:

$$D = \int_{-\infty}^{+\infty}(x - M)^2 f(x)dx\,. \qquad \text{(D-8.4.21)}$$

Disperzija se često izračunava na osnovu sledeće relacije:

$$D = \sum_{i=1}^{m}(x_i - \langle x\rangle)^2 f_i = \sum_{i=1}^{m} x_i^2 f_i - 2\langle x\rangle \sum_{i=1}^{m} x_i f_i + \langle x\rangle^2 \sum_{i=1}^{m} f_i =$$

$$= \sum_{i=1}^{m} x_i^2 f_i - \langle x\rangle^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2\,. \qquad \text{(D-8.4.22)}$$

Veličina:

$$\sigma = \sqrt{D} \qquad \text{(D-8.4.23)}$$

naziva se neodređenošću ili srednjom kvadratnom greškom.

Do sada smo posmatrali slobodne mikročestice i pokazali da njihovo kretanje može da se opiše De Broljijevim ravnim talasom. Sada želimo da nađemo mogućnost za proučavanje kretanja čestica u poljima različitih sila. Polazeći od prirode i osobina koje poseduju mikročestice i talasi a koje smo proučili u prethodnim poglavljima, formulisaćemo diferencijalnu jednačinu koja predstavlja osnovnu jednačinu za opisivanje pojava u mikrosvetu a koju je 1926. godine predložio Ervin Šredinger [Ervin Schrödinger (1887–1961), 1933. dobio Nobelovu nagradu za fiziku]. Šredingerova jednačina ima u kvantnoj mehanici ulogu analognu Njutnovim jednačinama u klasičnoj mehanici.

Zavisno promenljiva Šredingerove diferencijalne jednačine naziva se talasna funkcija i ona se tradicionalno obeležava sa Ψ. Talasna funkcija je u opštem slučaju funkcija koordinata, prostornih i spinskih, i često i vremena, i njome se predstavlja stanje sistema. Kada se sistem nalazi u stacionarnom stanju, talasna funkcija ne zavisi od vremena.

Talasna funkcija, koja je rešenje Šredingerove jednačine, sadrži sve podatke o sistemu. Kada je poznat oblik talasne funkcije, tada mogu da se izračunaju sve važne veličine za dati sistem, odnosno sve veličine koje u principu mogu da se mere. Ako se zna oblik talasne funkcije u početnom trenutku i polje sila, rešavanjem vremenski zavisne Šredingerove jednačine može da se odredi talasna funkcija, odnosno stanje sistema u svakom trenutku. Talasna funkcija je kompleksna funkcija te sama nema fizičko značenje. Međutim, proizvod funkcije Ψ i njoj konjugovano kompleksne funkcije Ψ^* realna je veličina kojoj se pridružuje određeni fizički smisao (gustina verovatnoće).

Kao i druge osnovne jednačine fizike (Njutnove, Maksvelove) Šredingerova jednačina se ne izvodi, već se postulira. Šredingerova jednačina je nerelativistička jednačina i može se primeniti samo na čestice koje se kreću brzinama koje su mnogo manje od brzina svetlosti. Ona, takođe, ne uzima u obzir spin.

Posmatrajmo slobodnu česticu mase m koja se kreće brzinom zanemarljivo malom u odnosu na brzinu svetlosti. Kinetička energija i impuls čestice povezani su tada jednačinom:

$$E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)\,. \tag{8.4.1}$$

Potencijalna energija slobodne čestice, U, jednaka je nuli, pa je ukupna energija jednaka njenoj kinetičkoj energiji.

Prema De Broljijevoj ideji, čestici možemo da pridružimo odgovarajući talas. Uzimajući u obzir izraz (D-3.1.6), lako nalazimo veze između čestičnih (energija E, impuls $\vec{p}$) i talasnih (frekvencija ω, talasni vektor $\vec{k}$) svojstava:

$$E = \hbar\omega\,,\ |\vec{p}| = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar|\vec{k}|\,,\ p_x = \hbar k_x\,,\ p_y = \hbar k_y\,,\ p_z = \hbar k_z\,. \tag{8.4.2}$$

Zamenom komponenti impulsa iz (8.4.2), u (8.4.1) nalazimo vezu između frekvencije i talasnog broja De Broljijevog talasa:

$$\omega = \frac{\hbar}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\,. \tag{8.4.3}$$

Međutim, ova jednačina nam ništa ne govori o obliku De Broljijevog talasa odnosno o promeni talasa kada na česticu deluje neka sila. Da bismo našli tu vezu, i jednačinu De Broljijevog ravnog talasa (8.1.23):

$$\Psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)} \tag{8.4.4}$$

izražavamo preko talasnog broja i frekvencije:

$$\Psi = Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}. \tag{8.4.5}$$

Sada tražimo zavisnost talasne funkcije od vremena i prostornih koordinata kada se čestica nađe u polju neke spoljašnje sile. Diferenciranjem funkcije (8.4.5) jednom po vremenu:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi, \qquad \omega = -\frac{1}{i\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{8.4.6}$$

i dva puta po koordinatama:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = (i)^2 k_x^2\Psi = -k_x^2\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} = -k_y^2\Psi, \qquad \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} = -k_z^2\Psi$$

dobijamo:

$$k_x^2 = -\frac{1}{\Psi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}, \qquad k_y^2 = -\frac{1}{\Psi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}, \qquad k_z^2 = -\frac{1}{\Psi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}. \tag{8.4.7}$$

Uvrštavanjem izraza za ω iz (8.4.6) i k_x^2, k_y^2 i k_z^2 iz (8.4.7) u jednačinu (8.4.3) dobijamo *vremenski zavisnu Šredingerovu jednačinu za slobodnu česticu*:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right). \tag{8.4.8}$$

Ovo je parcijalna diferencijalna jednačina prvog reda po vremenu i drugog reda po koordinatama. Ovakve jednačine se najlakše rešavaju metodom razdvajanja promenljivih. Rešenje tražimo u obliku proizvoda dve funkcije od kojih jedna zavisi samo od vremena, a druga samo od koordinata:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)f(t). \tag{8.4.9}$$

Tada su izvodi po vremenu i koordinatama:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \psi\frac{df}{dt}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = f\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}, \qquad \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} = f\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}, \qquad \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} = f\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}. \tag{8.4.10}$$

Zamenom dobijenih diferencijala u jednačinu (8.4.8), dobijamo:

$$-\frac{\hbar}{i}\psi\frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}f\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right). \tag{8.4.11}$$

Podelimo jednačinu (8.4.11) sa ψf:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{1}{f}\frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right). \tag{8.4.12}$$

Leva strana (8.4.12) sadrži funkciju f koja zavisi samo od vremena, a desna funkciju ψ zavisnu od prostornih koordinata. Kako su vreme i prostorne koordinate međusobno nezavisne promenljive, jednakost leve i desne strane biće zadovoljena samo ako su one jednake nekoj konstanti koju ćemo obeležiti sa E:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{1}{f}\frac{df}{dt} = E \tag{8.4.13}$$

odnosno:

$$\frac{df}{f} = -\frac{iE}{\hbar}dt. \tag{8.4.14}$$

Jednačina (8.4.14) može lako da se integrali:

$$\int\frac{df}{f} = -\frac{iE}{\hbar}\int dt \Rightarrow \ln f = -\frac{i}{\hbar}Et + \ln C$$

odnosno:

$$f = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{8.4.15}$$

gde je C konstanta integraljenja. Dobili smo, naravno, istu zavisnost talasne funkcije od vremena kao u (8.4.5) jer se na početku i zahtevalo da rešenje Šredingerove diferencijalne jednačine bude funkcija De Broljijevog talasa. Upoređivanjem (8.4.15) i (8.4.5) vidimo da je konstanta razdvajanja koju smo (ne slučajno) označili sa E, zaista jednaka energiji čestice.

Izjednačavanjem desnog dela jednačine (8.4.12) sa konstantom E dobijamo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) = E$$

a množenjem jednačine sa ψ i uvođenjem Laplasovog operatora:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

dobijamo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi. \tag{8.4.16}$$

Jednačina (8.4.16) predstavlja stacionarnu Šredingerovu jednačinu za slobodnu česticu. Kako je u ovom slučaju potencijalna energija čestice U jednaka nuli, E predstavlja istovremeno i kinetičku i ukupnu energiju čestice.

Stacionarnu Šredingerovu jednačinu (8.4.16) uopštićemo za slučaj kada se čestica kreće u polju sile. Čestica ukupne energije E, koja je prema uslovu (8.4.13) konstantna, u polju spoljašnje sile stiče potencijalnu energiju, U. Tada je njena kinetička energija jednaka razlici ukupne i potencijalne, $E - U$, što zamenom u jednačinu (8.4.16) daje:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi. \tag{8.4.17}$$

Time smo dobili opšti oblik *stacionarne Šredingerove jednačine*. Kada potencijalna energija U ne zavisi eksplicitno od vremena, što je slučaj koji će nas isključivo interesovati, vremenska zavisnost talasne funkcije je i za česticu u potencijalnom polju data jednačinom (8.4.15), pri čemu E kao i pre predstavlja ukupnu energiju.

Vremenski zavisna Šredingerova jednačina za česticu čija je potencijalna energija U je:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi. \tag{8.4.18}$$

U poređenju s izrazom (8.4.8) poslednja jednačina ima dodatni član kojim se opisuje uticaj spoljašnjih sila na kretanje čestice. Međutim, zbir članova na desnoj strani predstavlja ukupnu energiju čestice jer član sa Laplasovim operatorom odgovara kinetičkoj energiji.

Šredingerova jednačina je po svojoj matematičkoj strukturi parcijalna diferencijalna jednačina u kojoj se javljaju prvi parcijalni izvod funkcije Ψ po vremenu i drugi izvodi funkcije Ψ po prostornim koordinatama. Šredingerova jednačina se često naziva i **talasna jednačina** iako njena formalna sličnost sa talasnom diferencijalnom jednačinom (D-3.1.14), čije je jedno rešenje jednačina ravnog talasa (D-3.1.13) nije potpuna. Naime, Šredingerova jednačina je parcijalna diferencijalna jednačina prvog reda po vremenu i drugog po koordinatama dok je talasna diferencijalna jednačina drugog reda i po vremenu i po koordinatama. Zato je u formalnom pogledu Šredingerova jednačina sličnija npr., diferencijalnoj jednačini iz klasične fizike koja opisuje difuziju čestica u prostoru i vremenu. Sa druge strane, stacionarna Šredingerova jednačina (8.4.16) ima oblik jednačine stojećih talasa. Prema tome, u svim slučajevima kada nas interesuje prostorna zavisnost talasne funkcije, naziv talasna je sasvim odgovarajući. Inače, izraz **talasna funkcija** za funkcije koje su rešenja Šredingerove jednačine je svuda u širokoj upotrebi.

U opštem slučaju, talasna funkcija Ψ je kompleksna funkcija, pa joj zbog toga nije moguće pripisati fizički smisao. Međutim, proizvod funkcije Ψ i njoj konjugovano kompleksne funkcije Ψ^* je realna funkcija:

$$\Psi\Psi^* = \left(\psi^* e^{+\frac{i}{\hbar}Et}\right)\left(\psi\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\right) = \psi\psi^* \tag{8.4.19}$$

kojoj se može dati fizički smisao.