La funció Ψ en un rotor rígid:

La funció ψ(x,y,z) en coordenades polars ψ(r,θ,ϕ) = R(r).Y(θ,ϕ)

Per a aïllar l'energia de l'equació d'Schrödinger, cal deduïr R(r) i Y(θ,ϕ) per separat i llavors multiplicar-ho; obtindrem la suma d'energies en "l'eigenvalue" (altrament dit "valor propi"):

$$\left(\frac{m}{2}\right)[\dot{r}^2 + r^2.\dot{\theta}^2 + r^2.Sin^2\theta.\dot{\phi}^2] = E_{total}$$

vibració R(r) on r $\neq ctnt$ rotació Y(θ,ϕ), que se dissocia en φ(θ) i Θ(ϕ) i on r=ctnt.

$$\hat{H}.\psi(\mathrm{r},\theta,\phi) = E.\psi(\mathrm{r},\theta,\phi)$$

Primer considerarem que totes 3 variables r, θ, ϕ són dependents del temps, aleshores ψ(t)= r(t).θ(t).ϕ(t), llavors

- $\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi(t)}{dt} = \psi(t)E$, r(t), θ(t), ϕ(t), se deriven per separat tot i que són "acumulatives".

$\frac{-\hbar}{i}\dot{r} = E_1.r$ $\quad \dot{r}^2 = {E_1}^2.r^2$ $\quad \dot{r}^2 = (2/m)^2.r^2\,\frac{-i}{\hbar}$

r(t)= $e^{-i.t\frac{\sqrt{\frac{2}{m}}}{\hbar}}$

d'altra banda, tenim $\frac{-\hbar}{i}\frac{d\theta(t)}{dt} = E_2.\theta(t)$, $\dot{\theta}^2 = {E_2}^2.\theta^2\frac{-i}{\hbar}$

$\dot{\theta}^2 = (2/(m.r^2))^2.\theta^2$ $\quad \theta(t) = e^{-i.t\frac{\sqrt{\frac{2}{mr^2}}}{\hbar}}$

I finalment $\frac{-\hbar}{i}\frac{d\phi}{dt} = E_3.\phi(t)$

$\dot{\phi}^2 = \left(\frac{2}{mr^2.Sin^2\theta}\right)^2.\phi^2\frac{-i}{\hbar}$ $\quad \phi(t) = e^{-i.t\frac{\sqrt{\frac{2}{mr^2Sin^2\theta}}}{\hbar}}$

Totes les ψ’s acorden una mateixa energia ($E_{total} = E_r + E_\theta + E_\phi$) provinent d’elles.

No sé si podem afirmar que:

$\frac{\mathrm{d}\psi(\mathrm{t})}{dt}$= $\dot{r}\theta\phi + \dot{r}\dot{\theta}\phi + \dot{r}\theta\dot{\phi} + r\dot{\theta}\phi + r\dot{\theta}\dot{\phi} + r\theta\dot{\phi}$?

o simplement: $\frac{\mathrm{d}\psi(\mathrm{t})}{dt}$= $\dot{r}\theta\phi + \; r\dot{\theta}\phi + r\theta\dot{\phi}$?

$$\Phi(x)$$

$$\psi(p) \equiv \psi(k)$$

Ψ= $\Phi(x).\Psi$(t) o Ψ+V(x)+$\frac{L^2}{2I}$