



# Równanie Schrödingera

Dr hab. Maciej Czapkiewicz  
Instytut Elektroniki, paw. C-1, pok.321  
[czapkiew@agh.edu.pl](mailto:czapkiew@agh.edu.pl)  
<http://layer.uci.agh.edu.pl/Fizyka>



- Cząstki materii (elektrony, protony itp.) to paczki falowe
- Funkcje falowe opisują stan kwantowy cząstki bądź układu cząstek.
- Kwadrat modułu funkcji falowej określa prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w danym miejscu
- Jak wygląda równanie falowe dla fal materii?
- Równanie to musi być związane z **całkowitą energią cząstki** (Hamiltonian), która jest sumą energii kinetycznej i potencjalnej:

$$E(x, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x, t)$$



- Ervin Schrödinger, 1926: równanie własne mechaniki kwantowej, 1933: nagroda Nobla



SOLVAY CONFERENCE 1927

colourized by pastincolour.com

|             |            |              |              |               |                |                 |               |                 |             |              |
|-------------|------------|--------------|--------------|---------------|----------------|-----------------|---------------|-----------------|-------------|--------------|
| A. PICARD   | E. HENRIOT | P. EHRENFEST | Ed. HERSEN   | Th. DE DONDER | E. SCHRÖDINGER | E. VERSCHAFFELT | W. PAULI      | W. HEISENBERG   | R.H. FOWLER | L. BRILLOUIN |
| P. DEBYE    | M. KNUDSEN | W.L. BRAGG   | H.A. KRAMERS | P.A.M. DIRAC  | A.H. COMPTON   | L. de BROGLIE   | M. BORN       | N. BOHR         |             |              |
| I. LANGMUIR | M. PLANCK  | Mme CURIE    | H.A. LORENTZ | A. EINSTEIN   | P. LANGEVIN    | Ch.E. GUYE      | C.T.R. WILSON | O.W. RICHARDSON |             |              |

Absents : Sir W.H. BRAGG, H. DESLANDRES et E. VAN AUBEL



# Operatory energii i pędu

- Równanie fali materii (funkcja falowa jako fala biegnąca):

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

- Różniczkowanie po  $x$  zwraca wektor falowy  $k$ .

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

- Pęd jest proporcjonalny do wektora falowego:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

- Różniczkowanie po  $t$  zwraca częstość kołową  $\omega$ .

$$\omega = 2\pi f$$

- Energia jest proporcjonalna do częstości kołowej:

$$E = hf = \hbar\omega$$



# Operatory energii i pędu

- Różniczkowy operator pędu dla współrzędnej  $x$

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

- Różniczkowy wektorowy operator wektora pędu:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \nabla$$

- Różniczkowy operator energii:

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

- Operatory te dają pęd i energię, jeśli działają na funkcję falową  
 $\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$

# Równanie Schroedingera



- Operator Hamiltona:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r, t) = \hat{E}$$

- Operator Hamiltona, działający na funkcję falową, jest jednocześnie równaniem falowym, które ta funkcja falowa musi spełnić:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r, t) + V(r, t) \Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t)$$

- Zadanie: dla zerowego potencjału (cząstka swobodna) sprawdzić, czy fala biegnąca:

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \quad \text{spełnia powyższe równanie}$$

# Stacjonarne równanie Schroedingera



- Potencjał zależy tylko od odległości, nie od czasu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r, t) + V(r) \Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t)$$

- Można wtedy rozdzielić zmienne funkcji falowej na część przestrzenną i czasową, część czasowa zależy od energii:

$$\Psi(x, t) = A e^{-i\omega t} \psi(r) = A e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi(r)$$

- **Niezależne od czasu równanie Schroedingera:**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r)$$

# Przykłady z równaniem Schroedingera



- Rozważmy jednowymiarowe stacjonarne równanie Schroedingera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + (V(x) - E) \psi(x) = 0$$

- gdzie cząstka o energii  $E$  porusza się tylko wzdłuż osi  $x$ .
- Jest to jednorodne równanie różniczkowe drugiego rzędu, którego rozwiązaniem są funkcje falowe, np.:

$$\psi(x) = Ae^{ikx}$$

- Wystarczy więc znaleźć wektor falowy  $k$  i jego związek z energią (związek dyspersyjny).
- Ponadto należy dobrać amplitudy tak, aby funkcja była ciągła i różniczkowalna w całym zakresie  $x$ .





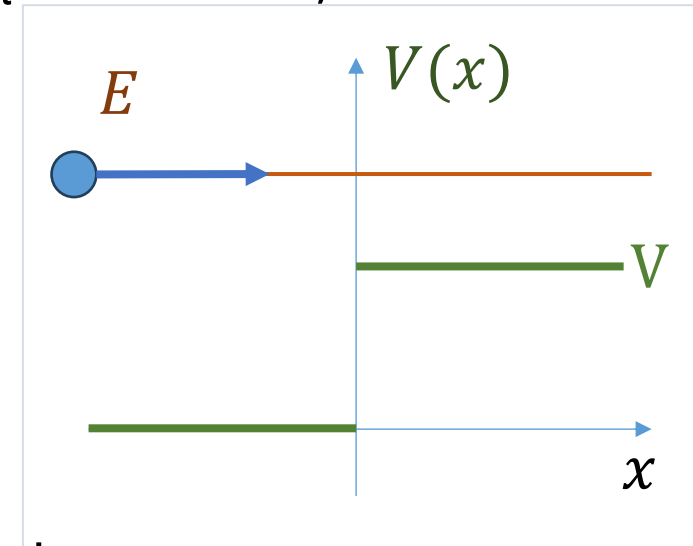
# Przykład: bariera potencjału

- Swobodna cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$ , natrafia na barierę potencjału (np. na granicy metal-próżnia)
- Bariera potencjału,  $V < E$ :

$$V(x) = 0, \text{ dla } x < 0$$

$$V(x) = V, \text{ dla } x \geq 0$$

- W mechanice klasycznej taka cząstka powinna oczywiście kontynuować swój ruch, tylko ze zmniejszoną prędkością (bo ma mniejszy pęd – skok potencjału odebrał część energii)
- W mechanice kwantowej rządzonej równaniem Schroedingera jest trochę inaczej, bo cząstki to fale...





# Przykład: bariera potencjału

- Swobodna cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$ , natrafia na barierę potencjału.

- Bariera potencjału,  $V < E$ :

$$V(x) = 0, \text{ dla } x < 0$$

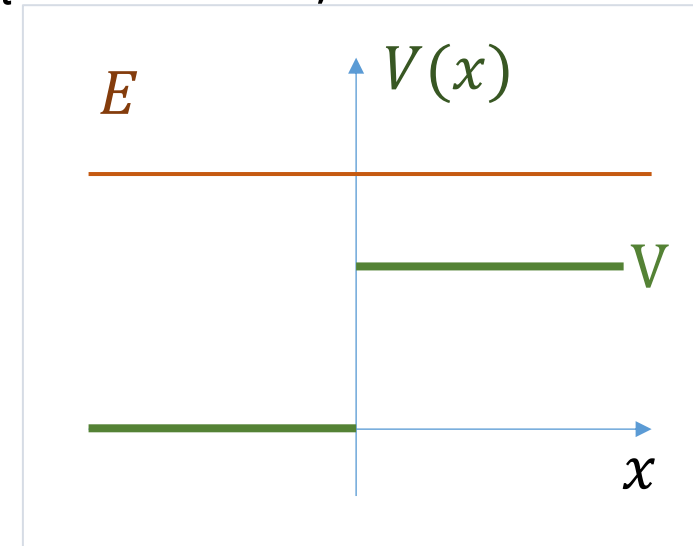
$$V(x) = V, \text{ dla } x \geq 0$$

- Funkcja falowa zależna od położenia, dla  $x < 0$  cząstka porusza się w lewo lub w prawo, bo istnieje pewna szansa na odbicie od bariery:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

- Dla  $x > 0$  cząstka porusza się tylko w prawo:

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x}$$





# Przykład: bariera potencjału

- Swobodna cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$ , natrafia na barierę potencjału,  $V < E$ .
- Bariera potencjału,  $V < E$ . Dla  $x < 0$ :

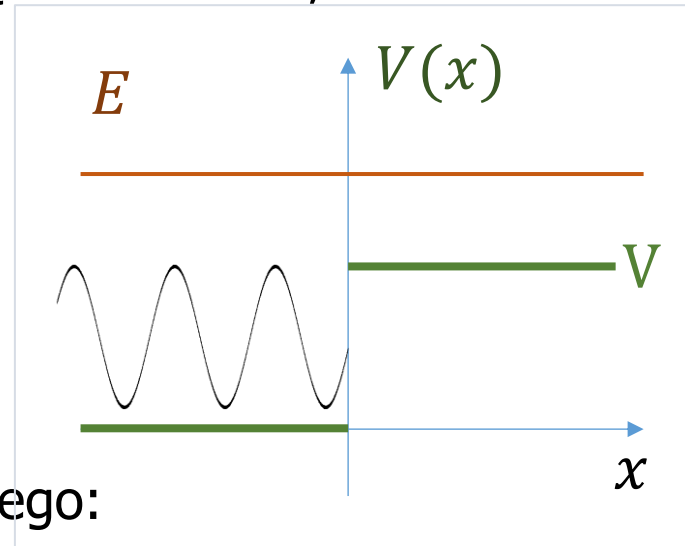
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) - E\psi(x) = 0$$

- Równanie to spełnia funkcja falowa, dla której związek energii i wektora falowego:

$$\frac{\hbar^2}{2m} k_1^2 = E \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

- Pęd takiej swobodnej cząstki:

$$p_1 = \sqrt{2mE}$$





# Przykład: bariera potencjału

- Swobodna cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$ , natrafia na barierę potencjału,  $V < E$ .
- Bariera potencjału,  $V < E$ . Dla  $x > 0$ :

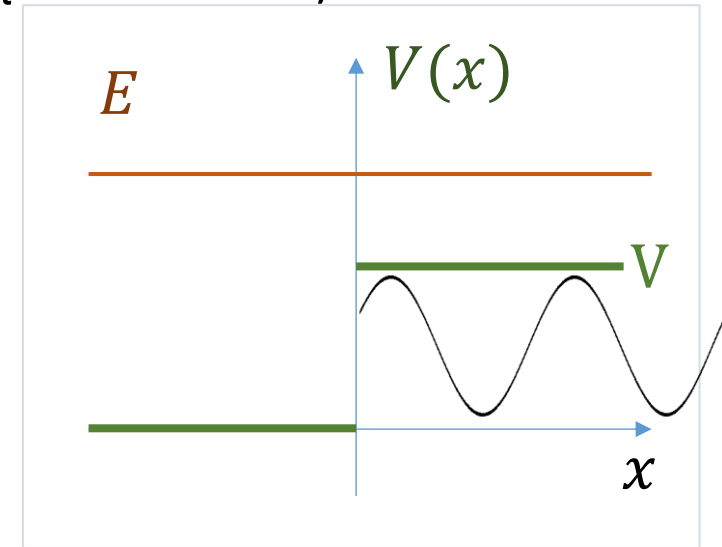
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + (V - E) \psi(x) = 0$$

- Równanie to spełnia funkcja falowa, dla której związek energii i wektora falowego:

$$\frac{\hbar^2}{2m} k_2^2 = E - V$$

- Pęd cząstki jest mniejszy (większa długość fali):

$$p_2 = \sqrt{2m(E - V)}$$





# Przykład: bariera potencjału

- Swobodna cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$ , natrafia na barierę potencjału,  $V < E$ .

- Funkcja musi być ciągła i różniczkowalna dla  $x = 0$

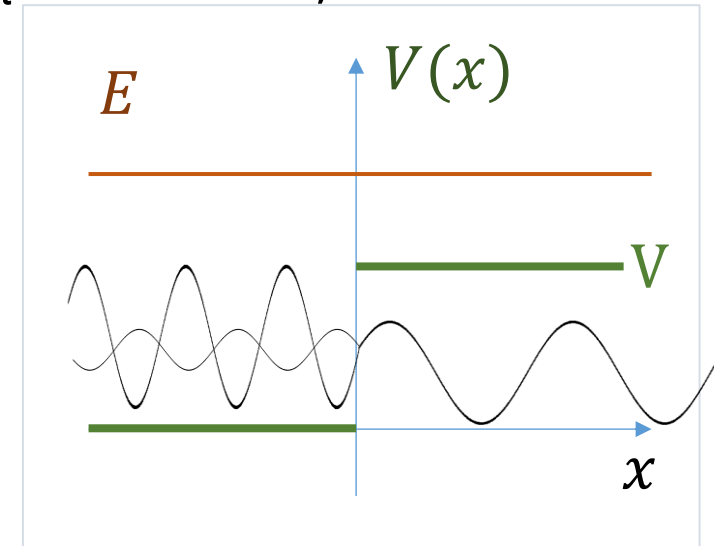
$$A + B = C$$

$$Ak_1 - Bk_1 = Ck_2$$

- Rozwiązując powyższy układ równań ze względu na  $B$  i  $C$ :

$$B = A \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad C = \frac{2Ak_1}{k_1 + k_2}$$

- Zadanie : sprawdzić, co by było dla  $k_1 = k_2$  ?



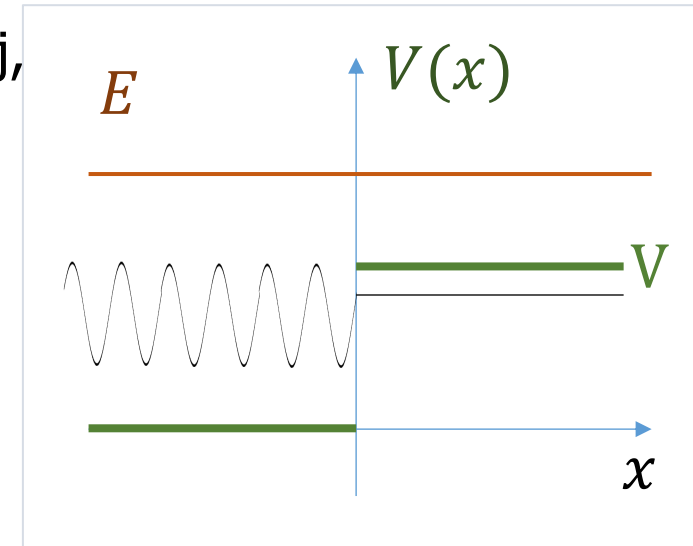


# Przykład: bariera potencjału

- Interpretacja amplitud A, B, C:
  1. amplituda danej składowej paczki falowej, dla pojedynczej cząstki
  2. natężenie strumienia cząstek.

- Kwadrat modułu funkcji falowej określa gęstość prawdopodobieństwa:

$$p(x) = \psi(x)\psi^*(x)$$



- W przypadku fali biegnącej w jednym kierunku, stała gęstość prawdopodobieństwa (jednorodny strumień cząstek):

$$p_2(x) = \psi_2(x)\psi_2^* = Ce^{ik_2x}Ce^{-ik_2x} = C^2$$

- Dla superpozycji fali padającej i odbitej dostajemy falę stojącą:

$$p_1(x) = (Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x})(Ae^{-ik_1x} + Be^{ik_1x}) = A^2 + B^2 + AB\cos 2k_1x$$



# Przykład: bariera potencjału

- Współczynnik transmisji i odbicia strumienia cząstek od bariery potencjału:

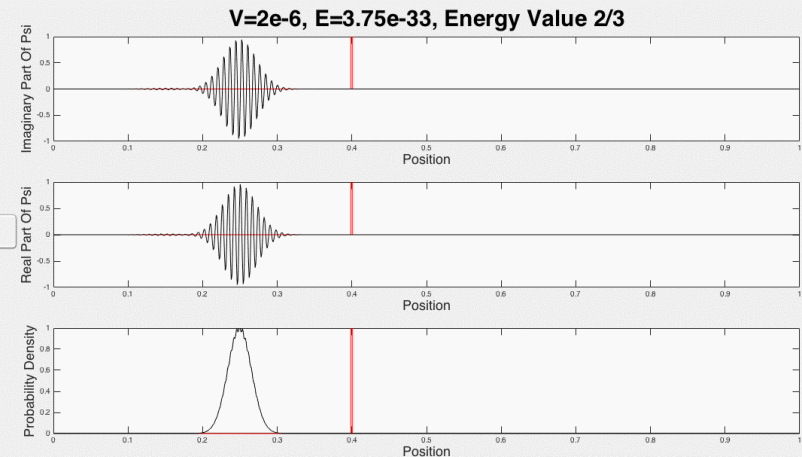
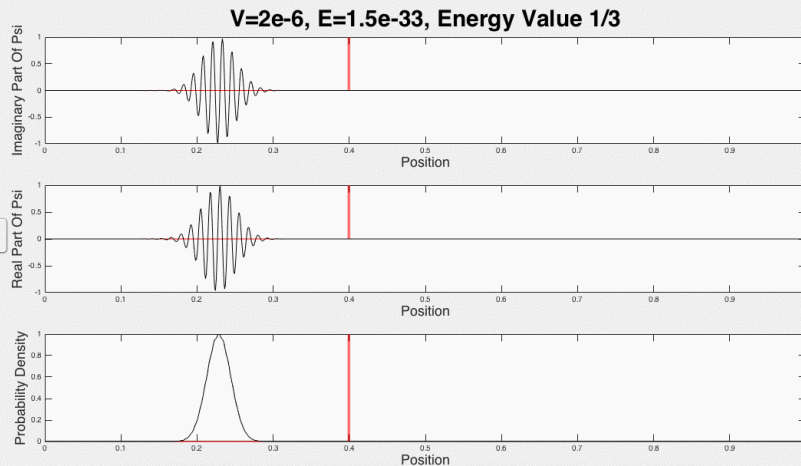
$$R = \frac{BB^*}{AA^*} = \frac{k_1^2 - k_2^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$T = 1 - R$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar}$$

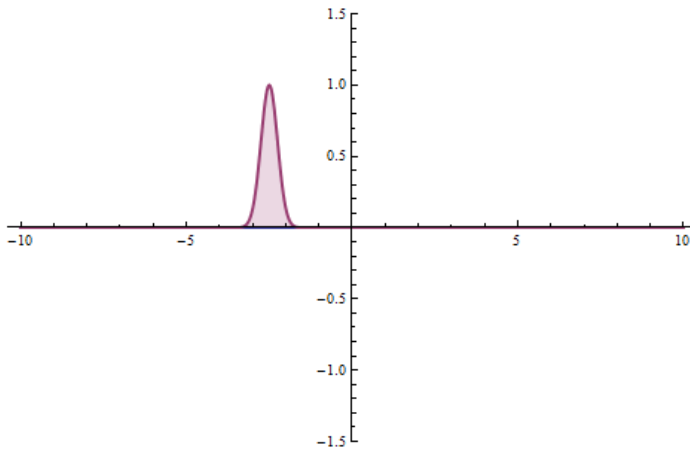
- Co się dzieje w przypadku pojedynczej cząstki? Odbije się czy przeleci?



# Superpozycja stanów kwantowych



- Cząstka znajduje się jednocześnie w każdym z możliwych stanów, np. jednocześnie przeszła i została odbita, do momentu dekoherencji kwantowej wskutek pomiaru stanu cząstki.





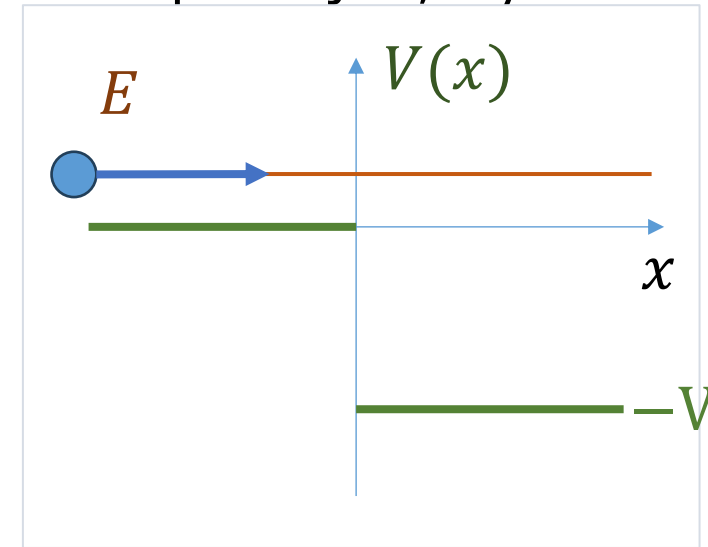


# Przykład: bariera potencjału

- Odbicie cząstki może nastąpić nawet od „dołka” potencjału, czyli w sytuacji, gdy cząstka trafia na krawędź obniżonego potencjału (np. na granicy jądra atomowego)

$$R = \frac{k_1^2 - k_2^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

- Zadanie: neutron powstały w wyniku rozpadu promieniotwórczego posiada energię  $E = 5 \text{ MeV}$ . Neutron trafia na jądro innego atomu, przy upraszczającym założeniu, że potencjał jądra jest schodkiem o wartości  $-50 \text{ MeV}$ , obliczyć prawdopodobieństwo odbicia  $R$





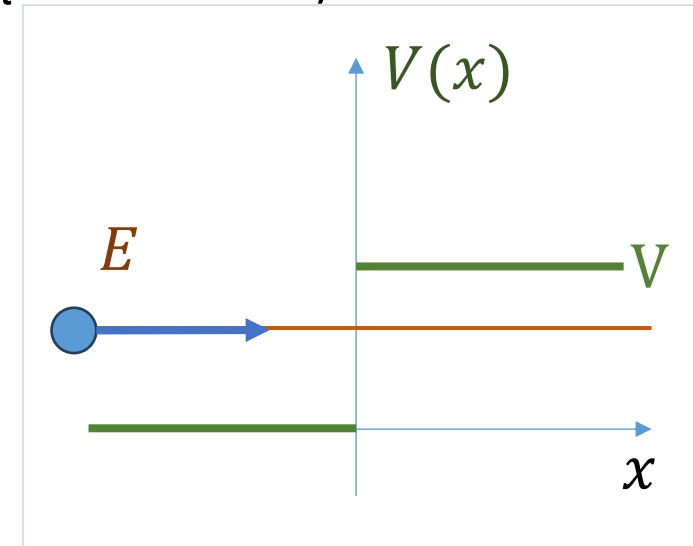
# Przykład: bariera potencjału

- Swobodna cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$ , natrafia na barierę potencjału (np. na granicy metal-próżnia)
- Bariera potencjału,  $V > E$ :

$$V(x) = 0, \text{ dla } x < 0$$

$$V(x) = V, \text{ dla } x \geq 0$$

- W mechanice klasycznej taka cząstka powinna oczywiście odbić się, jak piłka, od bariery potencjału
- W mechanice kwantowej rządzonej równaniem Schroedingera jest trochę inaczej, bo cząstki to fale...





# Przykład: bariera potencjału

- Swobodna cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$ , natrafia na barierę potencjału wyższą niż  $E$  (np. na granicy metal-próżnia)
- Dla  $x < 0$  funkcja falowa jest superpozycją ruchu w lewo i w prawo:

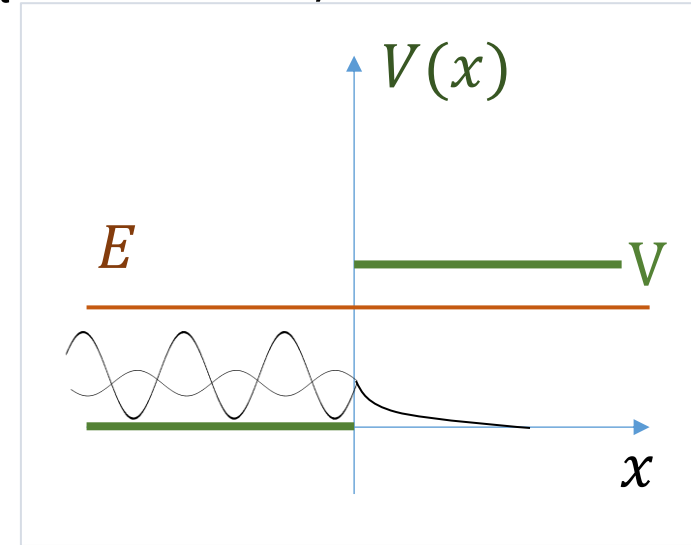
$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} - Be^{-ik_1x}$$

- Dla  $x > 0$  wartość własna równania Schroedingera jest liczbą urojoną:

$$k_2 = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(V - E)}$$

- Daje to rzeczywistą funkcję wykładniczą malejącą, czyli cząstka wnika wewnątrz zabronionego (klasycznie) obszaru:

$$\psi_2(x) = Ce^{-\frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V-E)} x}$$



# Przykład: tunelowanie przez skok potencjału



- Swobodna cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$ , natrafia na barierę potencjału wyższą niż  $E$ , bariera ta ma małą szerokość  $d$
- Dla  $x < 0$  funkcja falowa jest superpozycją ruchu w lewo i w prawo:

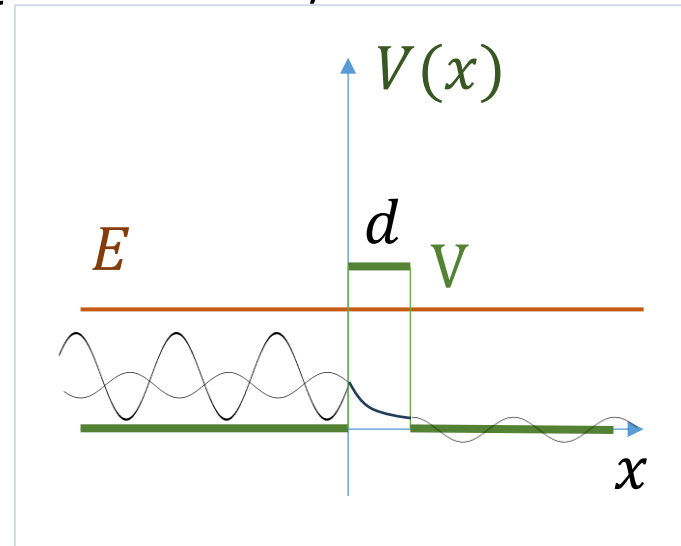
$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} - Be^{-ik_1x}$$

- Dla  $d > x > 0$  funkcja falowa jest wykładniczo malejąca:

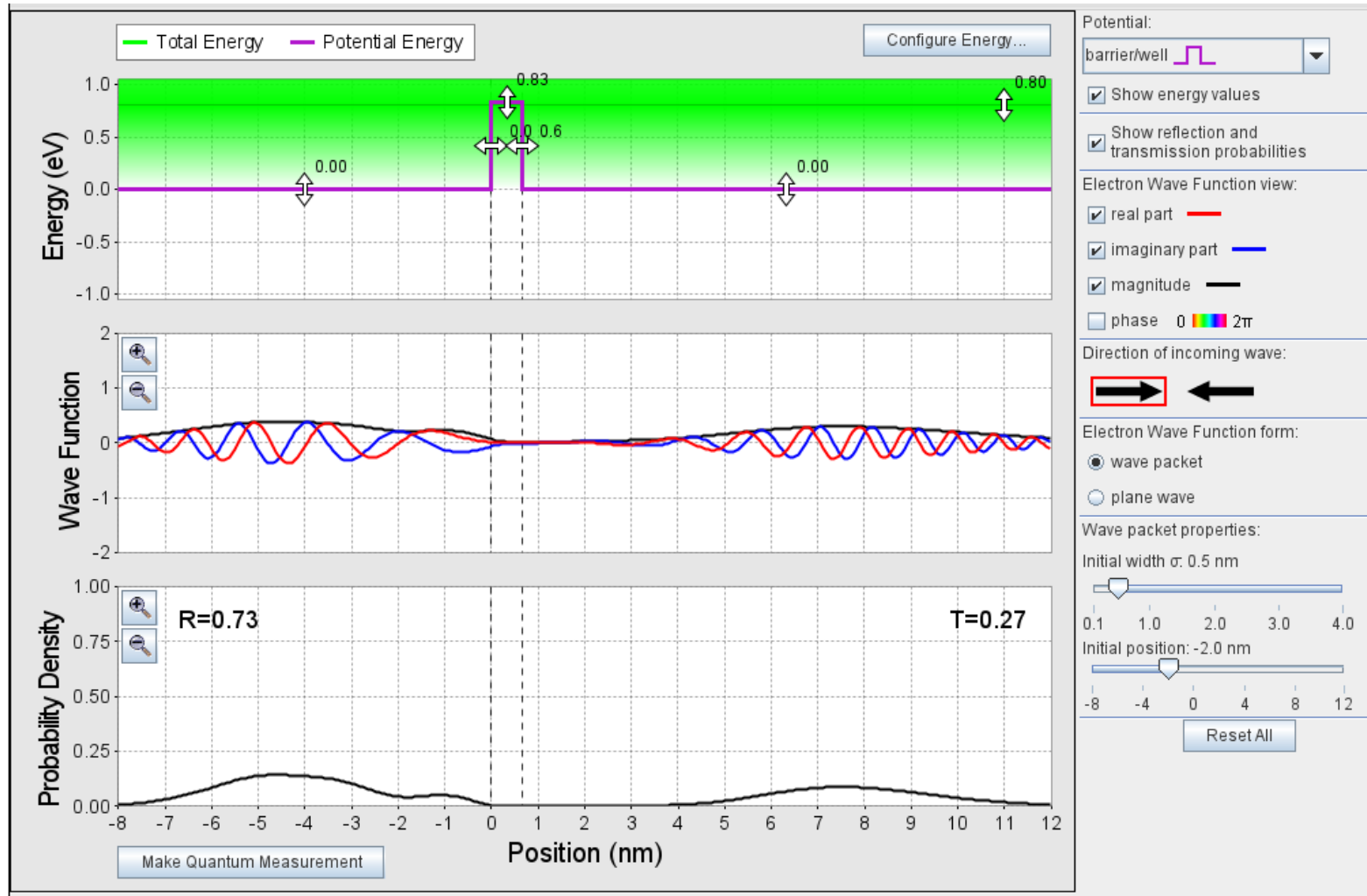
$$\psi_2(x) = Ce^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V-E)}x}$$

- Dla  $x > d$  funkcja falowa odpowiada cząstce, która przetunelowała przez barierę potencjału, amplituda zależy od szerokości bariery:

$$\psi_3(x) = De^{ik_1x}$$



# Przykład: tunelowanie przez skok potencjału



<https://phet.colorado.edu/sims/cheerpi/quantum-tunneling/latest/quantum-tunneling.html?simulation=quantum-tunneling>



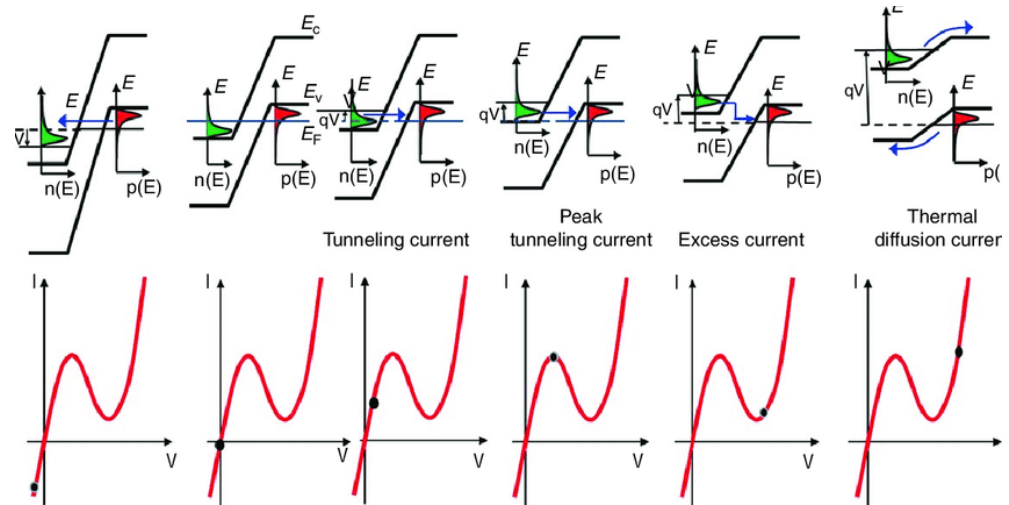
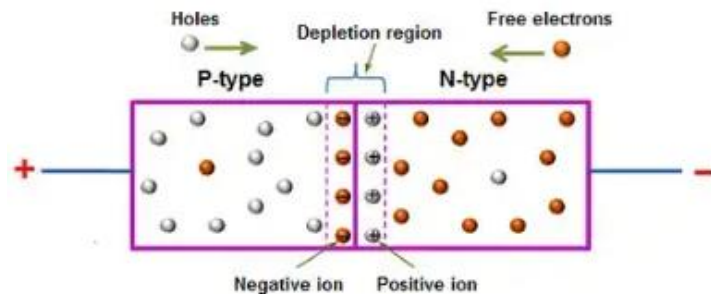
# Tunelowanie przez skok potencjału

- Prawdopodobieństwo tunelowania przez skok o szerokości  $d$ :

$$T \approx 16 \frac{E}{V} \left( 1 - \frac{E}{V} \right) e^{-2k_2 d}$$

- Przykłady efektu tunelowania w praktyce:
- Rozpad alfa: tunelowanie przez barierę potencjału na granicy jądra atomowego

- Dioda tunelowa (dioda Esakiego)

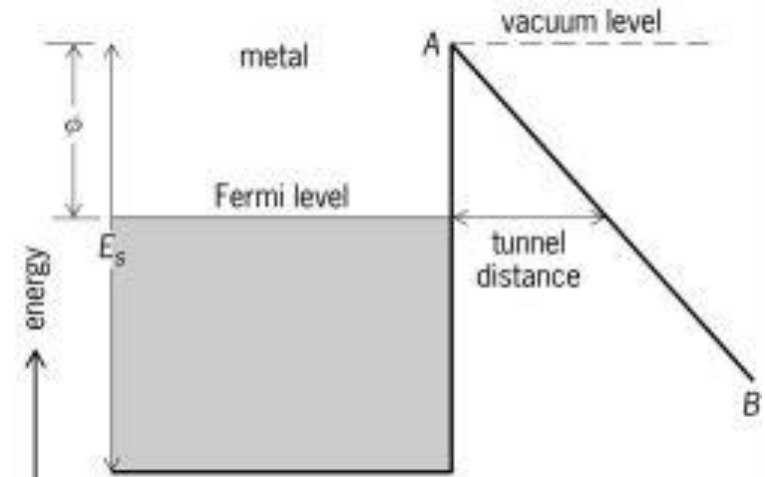
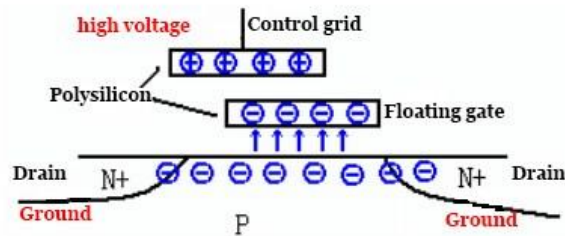


- Spinowo-zależne tunelowanie przez barierę izolatora (TMR)

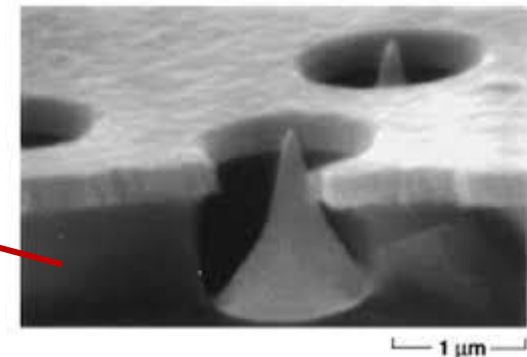
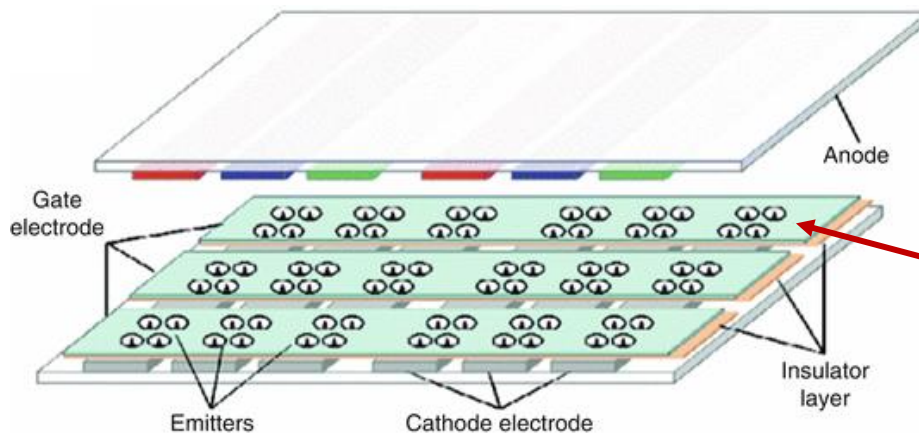


# Tunelowanie przez skok potencjału

- Przykłady efektu tunelowania w praktyce: zimna emisja polowa przez trójkątną barierę potencjału (Fowler-Nordheim Tunneling)
- ✓ polowy mikroskop elektronowy FEM
- ✓ komórki pamięci EEPROM



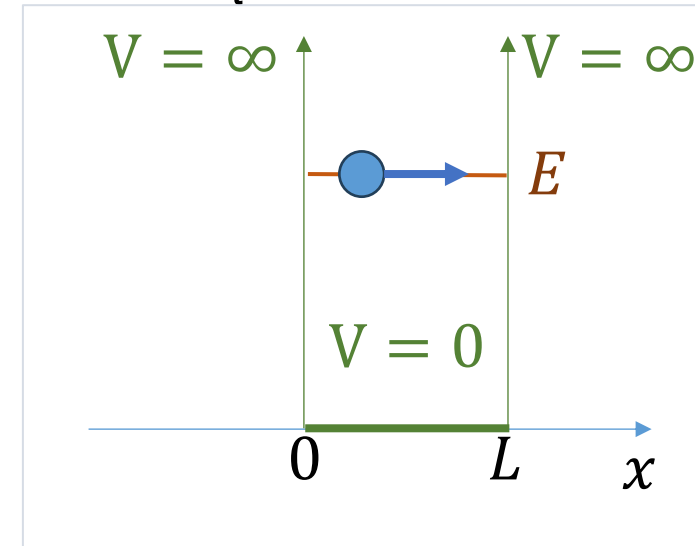
- ✓ wyświetlacz FED





# Przykład: cząstka w studni potencjału

- Cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$  wewnątrz studni nieskończenie dużego potencjału
- Studnia potencjału ma szerokość  $L$   
 $V(x) = 0$ , dla  $0 < x < L$   
 $V(x) = \infty$ , dla  $x > L, x < 0$
- Cząstka może przebywać wyłącznie wewnątrz tej studni.
- W mechanice klasycznej taka cząstka powinna mieć dowolną energię.
- W mechanice kwantowej rządzonej równaniem Schroedingera jest trochę inaczej, bo cząstki to fale...







# Przykład: cząstka w studni potencjału

- Cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$  wewnątrz studni nieskończenie dużego potencjału
- Funkcja falowa jest superpozycją ruchu w lewo i w prawo:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} - Be^{-ikx}$$

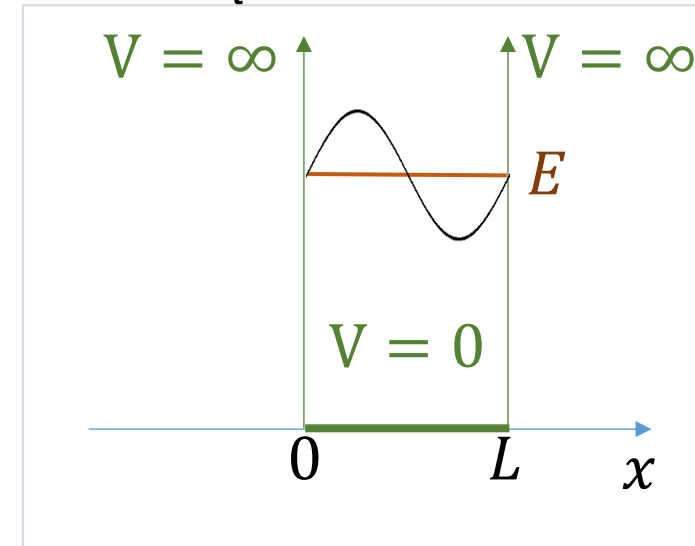
- Funkcja falowa musi się zerować na granicach studni, więc  $B = -A$

$$\psi(x) = A \sin kx$$

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

- Zadanie: wyznaczyć amplitudę funkcji falowej  $A$  za pomocą normalizacji gęstości prawdopodobieństwa:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \psi^*(x) dx = \int_0^L A^2 \sin^2 kx dx = 1$$





# Przykład: cząstka w studni potencjału

- Cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$  wewnątrz studni nieskończenie dużego potencjału

- Funkcja falowa to fala stojąca:

$$\psi(x) = A \sin kx$$

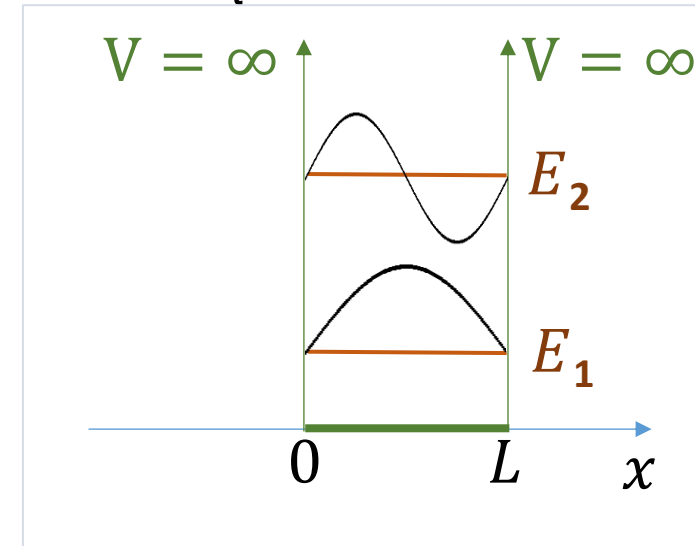
- Funkcja falowa musi się zerować na granicach studni, co narzuca wartości  $k$

$$kL = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots$$

- Kwantyzacja wektora falowego narzuca kwantyzację energii:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{L^2}$$

1. Energia w studni potencjału może mieć tylko określone wartości
2. Cząstka nie może mieć zerowej energii (zasada nieoznaczoności)





# Kwantowy oscylator harmoniczny

- Cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$  pod wpływem parabolicznego potencjału
- Równanie Schroedingera ( $S$  to stała sprężystości):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + \frac{Sx^2}{2} \psi(x) = E\psi(x) \quad \omega = \sqrt{S/m}$$

- Rozwiązaniem tego równania są wielomiany Hermita,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)$$

- które też narzucają kwantyzację energii:

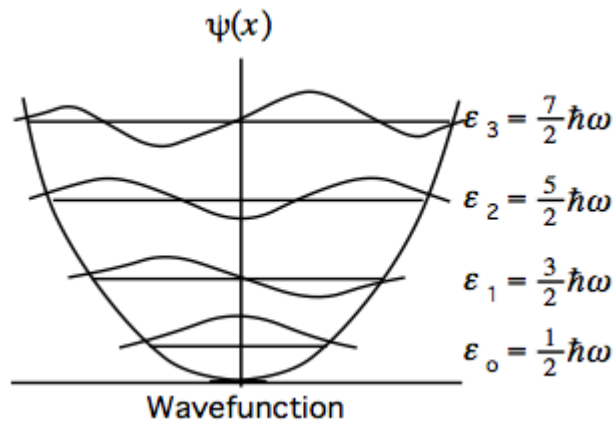
$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

- Jest to (prawie) zgodne z postulatem Plancka!

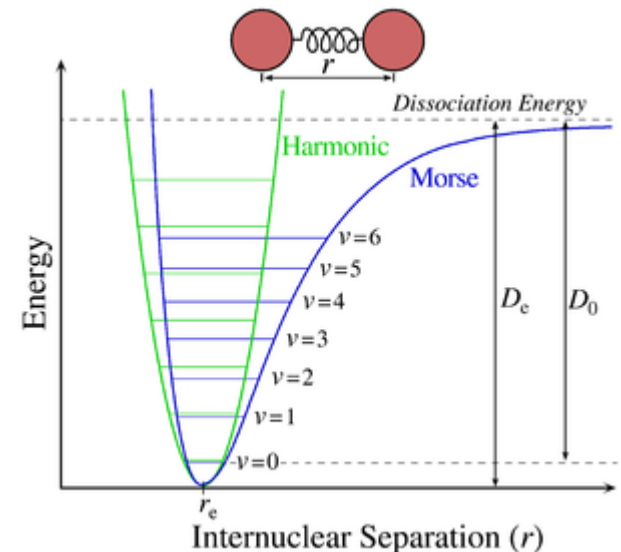
# Kwantowy oscylator harmoniczny



- Cząstka o energii  $E$  porusza się wzdłuż osi  $x$  pod wpływem parabolicznego potencjału. Jej energia jest skwantowana.



- Potencjał Lenarda-Jonesa lub potencjał Morse'a, opisujące oddziaływanie w wiązaniu chemicznym, jest (dla małych energii) podobny do potencjału oscylatora harmonicznego.



# Podsumowanie kwantowych efektów 1D



| Nazwa układu                                                | Przykład fizyczny                                            | Potencjał i energie całkowite | Gęstość prawdopodobieństwa | Istotna własność                                         |
|-------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|-------------------------------|----------------------------|----------------------------------------------------------|
| Potencjał zerowy                                            | Proton w wiązce cyklotronowej                                |                               |                            | Wyniki używane dla innych układów                        |
| Potencjał schodkowy (energia poniżej wierzchołka)           | Elektron w pasmie przewodnictwa w pobliżu powierzchni metalu |                               |                            | Przenikanie do obszaru wzbronionego                      |
| Potencjał schodkowy (energia powyżej wierzchołka)           | Neutron usiłujący opuścić jądro                              |                               |                            | Częściowe odbicie od nieciągłości potencjału             |
| Potencjał w kształcie bariery (energia poniżej wierzchołka) | Cząstka $\alpha$ usiłująca sforsować barierę kulombowską     |                               |                            | Tunelowanie                                              |
| Potencjał w kształcie bariery (energia powyżej wierzchołka) | Elektron rozpraszany na ujemnie zjonizowanym atomie          |                               |                            | Brak odbicia dla pewnych energii                         |
| Potencjał studni prostokątnej o skończonej głębokości       | Neutron związany w jądrze                                    |                               |                            | Kwantyzacja energii                                      |
| Potencjał nieskończenie głębokiej studni prostokątnej       | Cząstka zamknięta w pudle                                    |                               |                            | Przybliżenie studni prostokątnej o skończonej głębokości |
| Potencjał oscylatora harmonicznego                          | Atom drgającej cząsteczki dwuatomowej                        |                               |                            | Energia drgań zerowych                                   |

Źródło: R. Eisberg, R. Resnick,  
„Fizyka kwantowa”

# Podsumowanie



- Równanie Schroedingera jest odpowiednikiem równania ruchu dla mechaniki kwantowej traktującej cząstkę jako fale materii
- Jednowymiarowe stacjonarne równanie Schroedingera tłumaczy zjawiska kwantowe takie jak odbicie lub wnikanie cząstki w obszar skoku potencjału, tunelowanie przez barierę potencjału, kwantyzację energii uwięzionej cząstki.
- Do opisu atomu potrzebne jest 3D równanie Schroedingera
- Równanie Schroedingera jest równaniem nierelatywistycznym!
- Poprawkę relatywistyczną wprowadził P. Dirac, co pozwoliło na wyjaśnienie spinu, opracowanie statystyki fermionów i bozonów, przewidzenie antymaterii, zrozumienie nadprzewodnictwa...