NOTATKI

Równanie Schrödingera i kwantowanie energii

Równania różniczkowe i warunki brzegowe — od równania różniczkowego do dyskretnych poziomów energii.

WYDANIE	CZAS CZYTANIA	RYSUNKI	ANIMACJE	WZORY
22 listopada 2026	**ok. 14 min**	**4**	**4 + 1 film**	**12**

SPIS TREŚCI

1. Stacjonarne równanie Schrödingera
2. Równanie różniczkowe drugiego rzędu
3. Warunki brzegowe
4. Nieskończona studnia potencjału
5. Skończona studnia potencjału
6. Oscylator harmoniczny
7. Rozwiązanie numeryczne
8. Najważniejsze

PO TEJ LEKCJI POTRAFISZ

- wyprowadzić **stacjonarne** równanie Schrödingera z równania zależnego od czasu,
- rozwiązać je w obszarach o stałym potencjale i rozpoznać rozwiązania oscylujące i zanikające,
- wymienić **warunki brzegowe**, które musi spełniać funkcja falowa, i wyjaśnić, skąd się biorą,
- wyznaczyć poziomy energii i funkcje falowe **nieskończonej studni potencjału**,
- wyjaśnić, dlaczego **skończona studnia** ma skończenie wiele stanów związanych i czym jest tunelowanie,
- porównać widma energii studni i **oscylatora harmonicznego**,
- zamienić równanie na zagadnienie własne macierzy i rozwiązać je **numerycznie**.

Stacjonarne równanie Schrödingera

Stan cząstki poruszającej się w jednym wymiarze opisuje funkcja falowa $\Psi(x,t)$. Jej ewolucję w czasie wyznacza **równanie Schrödingera zależne od czasu**:

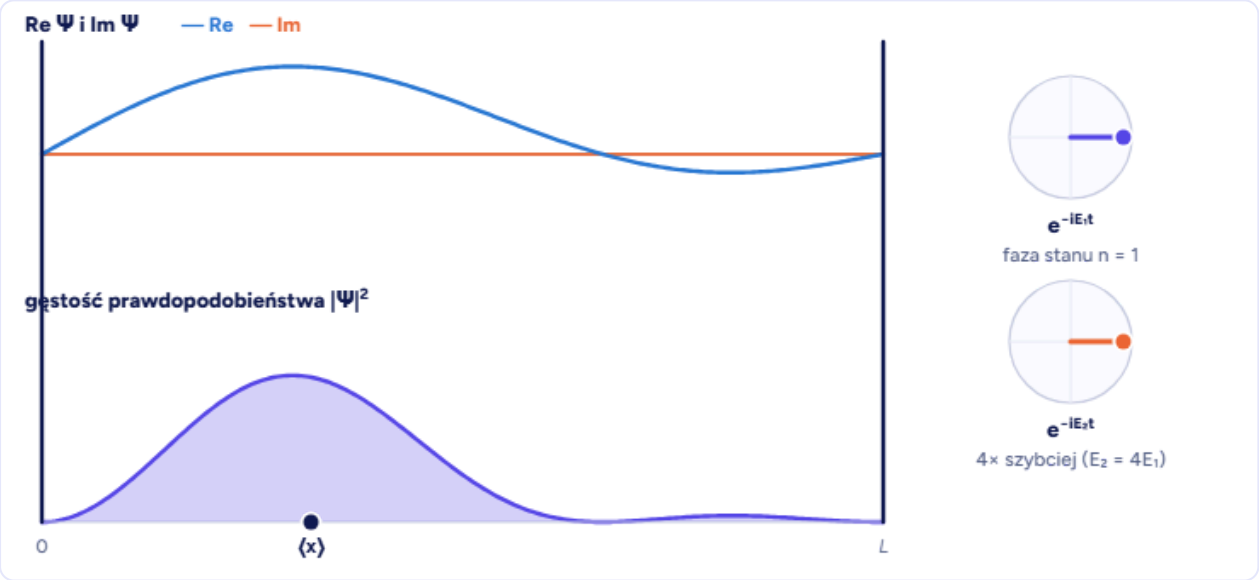
$$i\hbar\,\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\,\Psi \tag{1}$$

Jeśli potencjał $V(x)$ nie zależy od czasu, szukamy rozwiązań w postaci iloczynu $\Psi(x,t) = \psi(x)\,\varphi(t)$. Po podstawieniu i podzieleniu przez $\psi\varphi$ lewa strona zależy tylko od t, a prawa tylko od x — obie muszą więc być równe tej samej stałej, którą oznaczamy E. Część czasowa daje $\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$, a część przestrzenna — **stacjonarne równanie Schrödingera**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(x) + V(x)\,\psi(x) = E\,\psi(x) \tag{2}$$

Pierwszy wyraz to energia kinetyczna, drugi — potencjalna, a ich suma to całkowita energia E. Krócej zapisujemy to jako **zagadnienie własne** operatora energii (hamiltonianu): $\hat{H}\psi = E\psi$.

> **STAN STACJONARNY**
>
> Dla $\Psi(x,t) = \psi(x)\,e^{-iEt/\hbar}$ gęstość prawdopodobieństwa $|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$ **nie zmienia się w czasie**. Dlatego stany o określonej energii nazywamy stacjonarnymi. Ruch pojawia się dopiero w **superpozycji** stanów o różnych energiach.



Animacja 1. Wybierz stan własny albo superpozycję. Strzałki to fazy e^{-iE_nt}: w stanie własnym $|\Psi|^2$ stoi w miejscu, a w superpozycji fazy obracają się z różną prędkością i gęstość zaczyna się przelewać. **Wersja interaktywna jest w lekcji online.**

Równanie różniczkowe drugiego rzędu

Przepiszmy równanie (2) tak, by widać było krzywiznę funkcji falowej:

$$\psi''(x) = -\frac{2m\,\big(E - V(x)\big)}{\hbar^2}\,\psi(x) \tag{3}$$

Znak różnicy $E - V$ decyduje o charakterze rozwiązania:

- $E > V$ **(obszar klasycznie dozwolony)** — ψ'' ma znak przeciwny do ψ, więc funkcja zakrzywia się w stronę osi i **oscyluje**.
- $E < V$ **(obszar klasycznie zabroniony)** — ψ'' ma ten sam znak co ψ, więc funkcja odgina się od osi i rośnie lub **zanika wykładniczo**.

W obszarze, w którym potencjał jest stały, rozwiązania znamy dokładnie:

$$E > V: \quad \psi(x) = A\sin kx + B\cos kx, \qquad k = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar} \tag{4}$$

$$E < V: \quad \psi(x) = C\,e^{\kappa x} + D\,e^{-\kappa x}, \qquad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar} \tag{5}$$

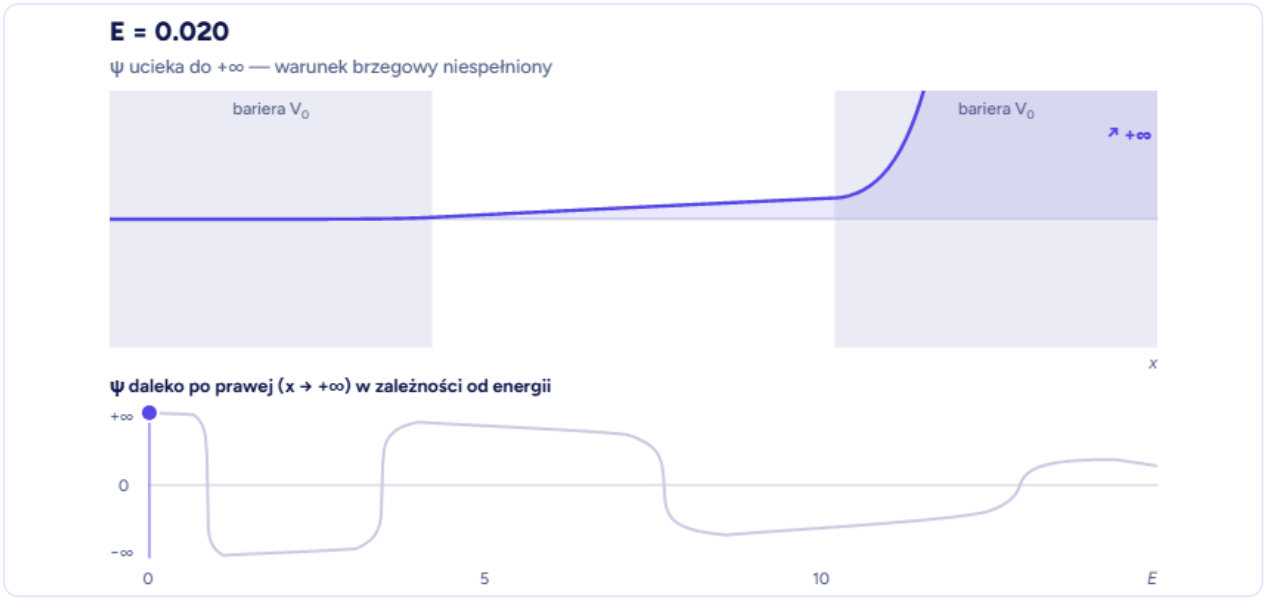
Równanie drugiego rzędu ma w każdym obszarze **dwie stałe dowolne**. Równanie (2) da się rozwiązać dla *każdej* wartości E — to dodatkowe warunki wybierają spośród tych rozwiązań te, które są fizycznie dopuszczalne.

Warunki brzegowe

Funkcja falowa musi opisywać rozsądny rozkład prawdopodobieństwa. Wynikają z tego cztery warunki:

1. ψ **jest ciągła** wszędzie — gęstość prawdopodobieństwa nie może skakać.
2. ψ' **jest ciągła** wszędzie tam, gdzie potencjał jest skończony (nawet jeśli ma skok). Wynika to z całkowania równania (3) po małym przedziale wokół skoku.
3. $\psi \to 0$ **dla** $|x| \to \infty$ dla stanów związanych, tak aby funkcję dało się **unormować**: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\,dx = 1$.
4. $\psi = 0$ **tam, gdzie** $V = \infty$ — cząstka nie może przebywać w obszarze o nieskończonej energii potencjalnej. W takim punkcie pochodna ψ' może mieć skok.

> **SKĄD BIERZE SIĘ KWANTOWANIE ENERGII?**
>
> Rozwiązanie równania różniczkowego istnieje dla każdego E, ale **jednocześnie** spełnia wszystkie warunki brzegowe tylko dla wybranych wartości energii. Warunków jest więcej niż swobodnych stałych — to nadmiarowe „wymagania" wycinają z ciągłego zbioru energii dyskretny zbiór $E_1, E_2, E_3, \ldots$



Animacja 2. Metoda strzałów: dla każdej energii E liczymy funkcję falową od lewej strony. Daleko po prawej zanika ona tylko dla wybranych energii — to są poziomy E_n. Możesz przeciągać po dolnym wykresie albo skakać do kolejnych stanów własnych. **Wersja interaktywna jest w lekcji online.**

STRUNA GITARY

Struna zamocowana na obu końcach drga tylko z takimi długościami fali, które mieszczą całkowitą liczbę połówek fali na długości struny: $L = n\,\lambda/2$. Zamocowanie końców to warunek brzegowy — i to on sprawia, że struna ma dyskretny zbiór tonów. Funkcja falowa w studni potencjału zachowuje się tak samo.



Animacja 3. Od struny do studni potencjału. Suwakiem osi czasu zatrzymasz film w dowolnym momencie. **Wersja interaktywna jest w lekcji online.**

Nieskończona studnia potencjału

Najprostszy układ, w którym widać kwantowanie, to cząstka zamknięta w „pudle” o szerokości L:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & \text{poza studnią} \end{cases}$$

Wewnątrz studni $V = 0$, więc z (4): $\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$, gdzie $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Poza studnią $\psi = 0$ (warunek 4). Ciągłość na ściankach daje dwa warunki brzegowe:

- $\psi(0) = 0 \;\Rightarrow\; B = 0$,
- $\psi(L) = 0 \;\Rightarrow\; A\sin kL = 0$.

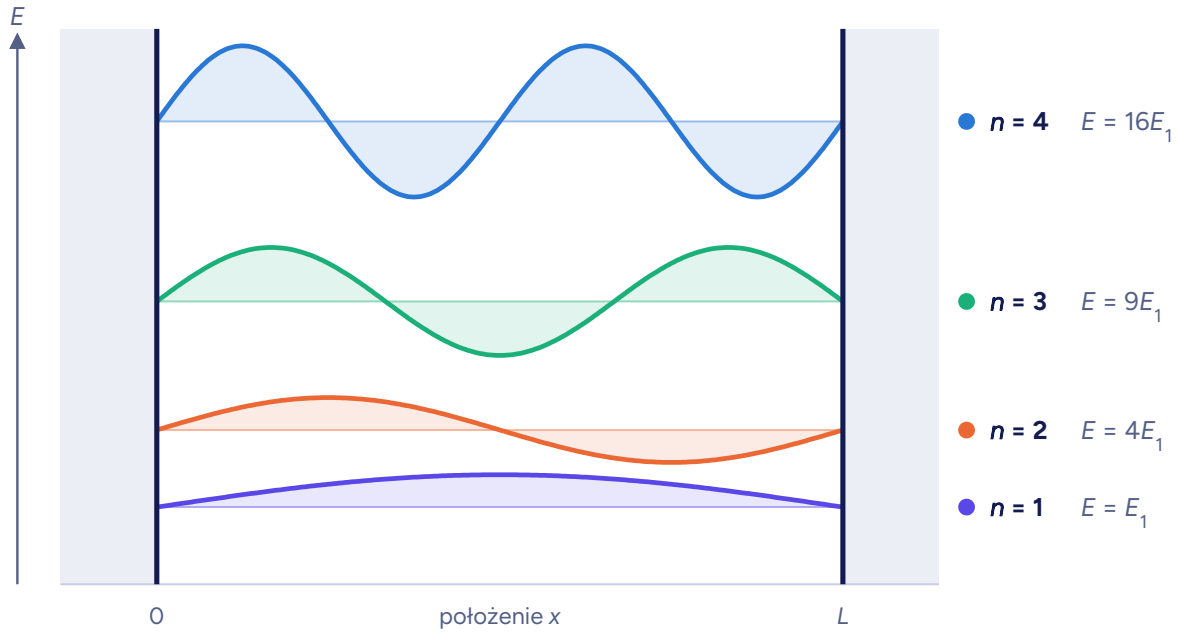
Rozwiązanie $A = 0$ oznacza brak cząstki, więc musi być $\sin kL = 0$, czyli $kL = n\pi$. Stąd:

$$k_n = \frac{n\pi}{L}, \qquad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{6}$$

Warunek normalizacji $\int_0^L A^2 \sin^2(n\pi x/L)\,dx = 1$ wyznacza amplitudę $A = \sqrt{2/L}$:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\frac{n\pi x}{L} \tag{7}$$

Wartość $n = 0$ daje $\psi \equiv 0$, a ujemne n dają te same funkcje z przeciwnym znakiem — dlatego n przebiega tylko liczby $1, 2, 3, \ldots$



Rys. 1. Pierwsze cztery stany nieskończonej studni. Każda funkcja falowa jest narysowana na wysokości swojej energii; na ściankach zawsze $\psi = 0$.

Własności rozwiązań

- **Energia zerowa.** Najniższa energia $E_1 = \pi^2\hbar^2/(2mL^2)$ jest dodatnia — cząstka w studni nigdy nie spoczywa. Zgadza się to z zasadą nieoznaczoności: $\Delta x \sim L$ wymusza $\Delta p \gtrsim \hbar/L$.

- **Odstępy rosną.** $E_n = n^2 E_1$, więc $E_{n+1} - E_n = (2n+1)\,E_1$.
- **Mniejsze pudło — większe energie.** $E_n \propto 1/L^2$. Z tego powodu kropki kwantowe mniejszych rozmiarów świecą bardziej niebieskim światłem.
- **Węzły.** Funkcja ψ_n ma $n-1$ węzłów (miejsc zerowych wewnątrz studni).
- **Ortogonalność.** $\int_0^L \psi_m\,\psi_n\,dx = \delta_{mn}$ — różne stany są do siebie prostopadłe.
- **Parzystość.** Względem środka studni stany o nieparzystym n są symetryczne, a o parzystym — antysymetryczne.

ELEKTRON W STUDNI O SZEROKOŚCI 1 NM

Dla $m = m_e = 9{,}11 \cdot 10^{-31}$ kg i $L = 1$ nm:

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_eL^2} = \frac{h^2}{8m_eL^2} \approx 6{,}0 \cdot 10^{-20}\ \text{J} \approx 0{,}38\ \text{eV}$$

Wtedy $E_2 = 4E_1 \approx 1{,}50$ eV, a przejście $2 \to 1$ wypromieniowuje foton o energii $\Delta E = 3E_1 \approx 1{,}13$ eV, czyli o długości fali $\lambda = hc/\Delta E \approx 1{,}1\ \mu$m (podczerwień).

TEN SAM WYNIK Z FAL DE BROGLIE'A

Warunek $L = n\lambda/2$ daje $\lambda_n = 2L/n$ i pęd $p_n = h/\lambda_n = nh/(2L)$. Energia $E_n = p_n^2/(2m) = n^2h^2/(8mL^2)$ — dokładnie wzór (6). Studnia działa jak struna dla fali materii.

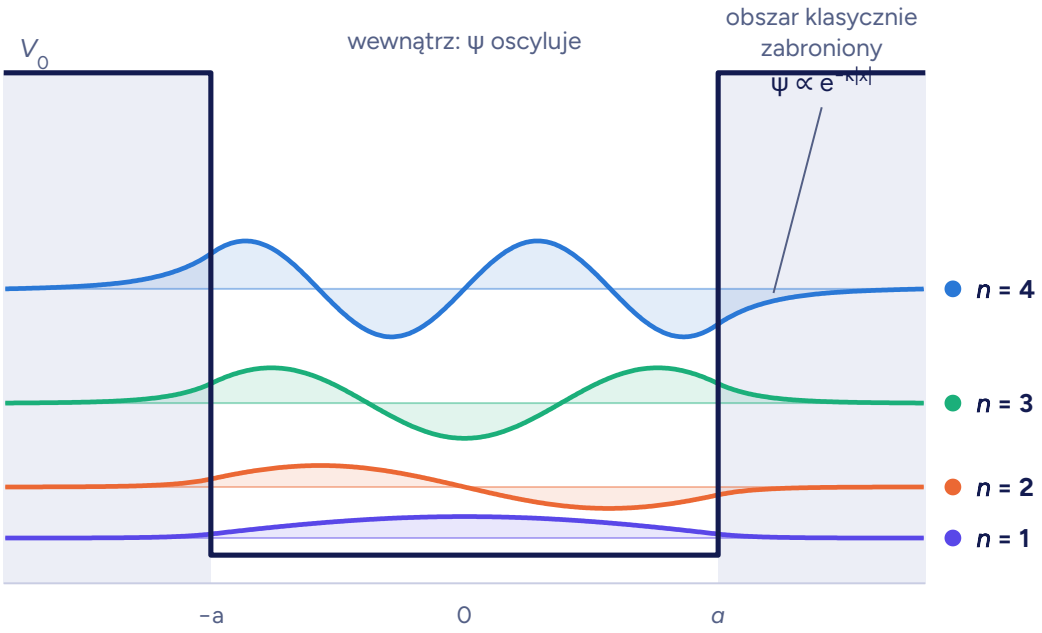
Skończona studnia potencjału

Ściany prawdziwych studni (np. w heterostrukturach półprzewodnikowych) mają skończoną wysokość. Rozważmy studnię symetryczną o szerokości $L = 2a$:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ V_0, & |x| > a \end{cases}$$

Szukamy **stanów związanych**, czyli takich, dla których $0 < E < V_0$. Wewnątrz studni funkcja oscyluje z liczbą falową $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, a na zewnątrz zanika jak $e^{-\kappa|x|}$, gdzie $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ (rosnący wykładniczo człon odrzucamy na mocy warunku 3). Zauważ, że

$$k^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \tag{8}$$



Rys. 2. Cztery najniższe stany skończonej studni. Wewnątrz funkcja oscyluje, a w obszarze klasycznie zabronionym (szary) zanika wykładniczo — ale nie jest tam zerem.

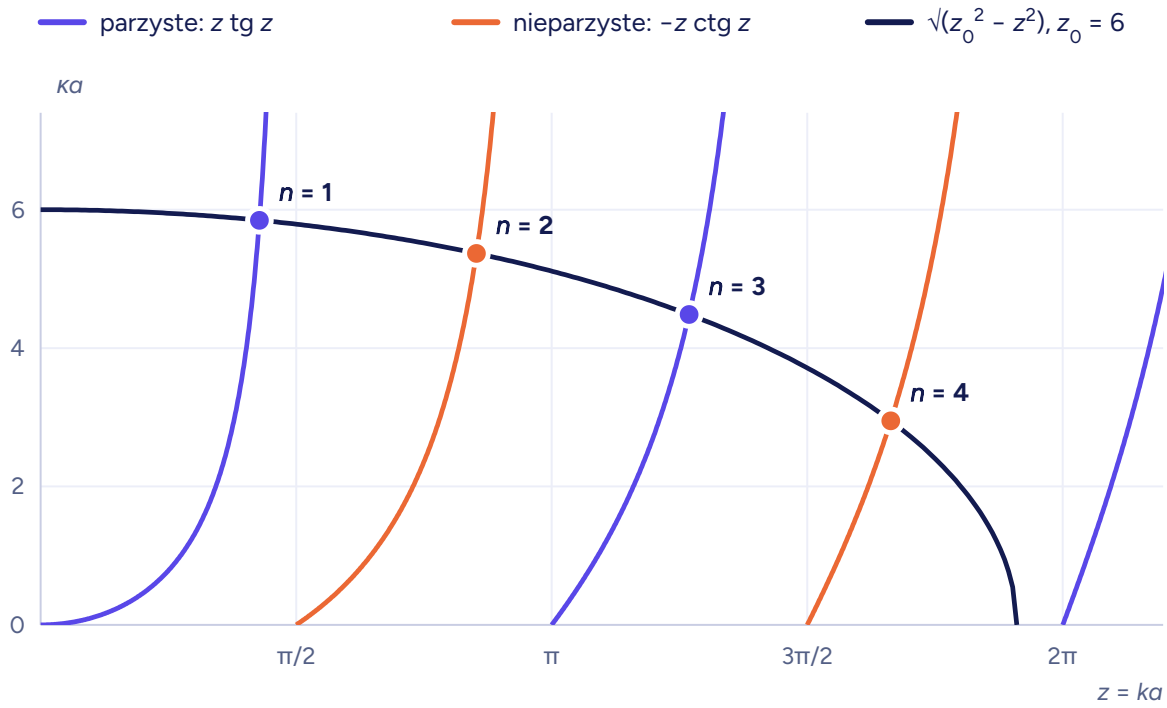
Potencjał jest symetryczny, więc rozwiązania są parzyste ($\cos kx$ w środku) albo nieparzyste ($\sin kx$). Ciągłość ψ i ψ' w punkcie $x = a$ daje:

$$\kappa = k\ \mathrm{tg}(ka)\ \ (\text{parzyste}), \qquad \kappa = -k\ \mathrm{ctg}(ka)\ \ (\text{nieparzyste}) \tag{9}$$

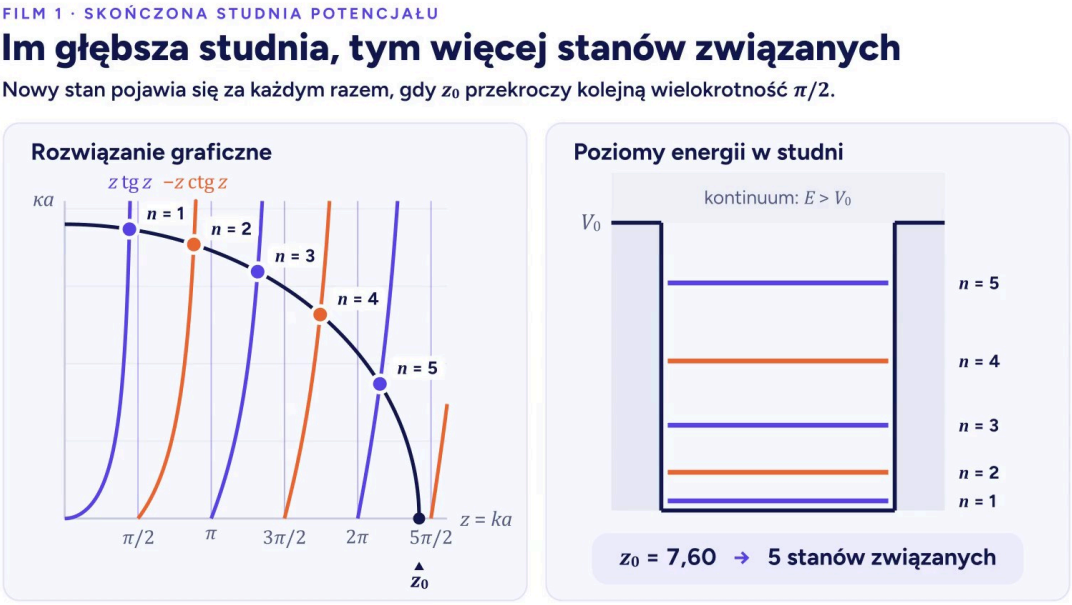
Wprowadźmy bezwymiarowe $z = ka$ oraz $z_0 = a\sqrt{2mV_0}/\hbar$. Z (8) mamy $\kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2}$, a warunki (9) przyjmują postać

$$z\ \mathrm{tg}\, z = \sqrt{z_0^2 - z^2} \qquad \text{oraz} \qquad -z\ \mathrm{ctg}\, z = \sqrt{z_0^2 - z^2} \tag{10}$$

To **równania przestępne** — nie da się ich rozwiązać wzorem, ale łatwo graficznie lub numerycznie. Każdy punkt przecięcia to jeden stan związany.



Rys. 3. Graficzne rozwiązanie równań (10) dla $z_0 = 6$. Ćwiartka okręgu przecina na przemian gałęzie parzyste i nieparzyste — tu cztery razy, więc studnia ma cztery stany związane.

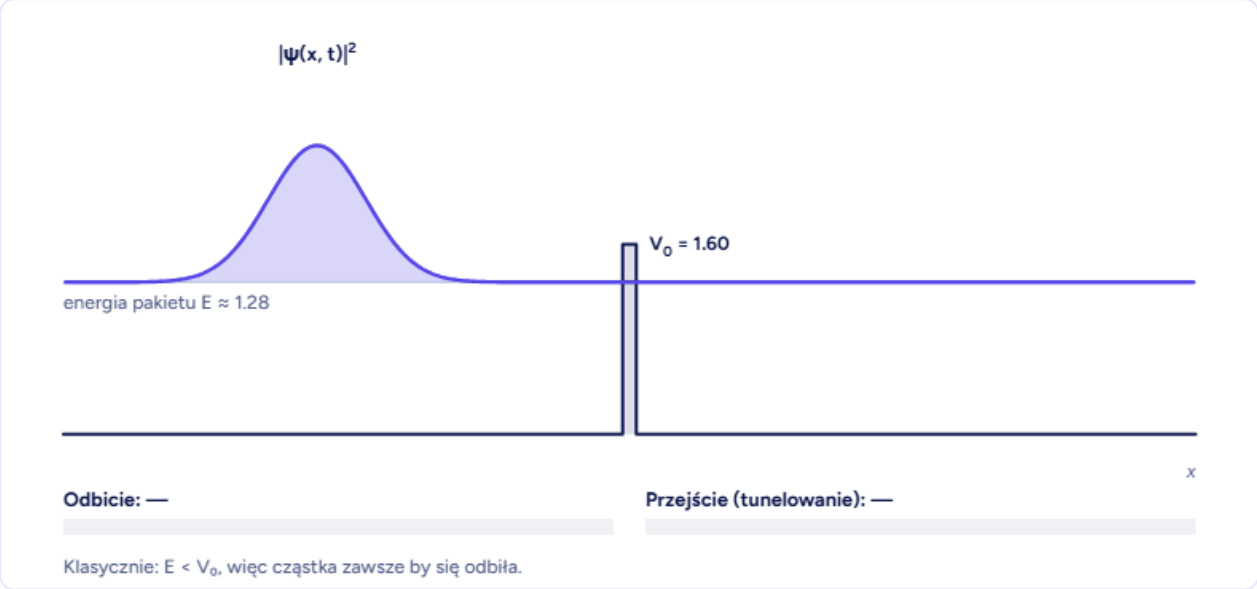


Film 1. Głębsza studnia to większe z_0: okrąg przecina kolejne gałęzie, a w studni pojawiają się nowe poziomy energii, które „wynurzają się” spod krawędzi V_0. **Film jest w lekcji online.**

Co wynika z rozwiązania

- **Skończenie wiele stanów.** Nowa gałąź zaczyna się co $\pi/2$, więc liczba stanów związanych wynosi $N = \lfloor 2z_0/\pi \rfloor + 1$. Rośnie z głębokością V_0 i szerokością studni.

- **Zawsze co najmniej jeden stan.** W jednym wymiarze nawet bardzo płytka studnia wiąże cząstkę (pierwsza gałąź zaczyna się w $z = 0$).
- **Energie niższe niż w nieskończonej studni.** Funkcja falowa „wylewa się" pod barierę, więc efektywnie studnia jest szersza, a energie mniejsze. Dla $V_0 \to \infty$ odzyskujemy wzór (6) z $L = 2a$.
- **Tunelowanie.** Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w obszarze klasycznie zabronionym jest niezerowe. Typowa głębokość wnikania to $\delta = 1/\kappa$ — rośnie, gdy energia zbliża się do V_0.



Animacja 4. Pakiet falowy o energii mniejszej niż wysokość bariery. Klasycznie zawsze by się odbił — kwantowo część prawdopodobieństwa przechodzi na drugą stronę. Zmieniaj wysokość i szerokość bariery oraz energię pakietu. **Wersja interaktywna jest w lekcji online.**

CIĄGŁOŚĆ POCHODNEJ

W nieskończonej studni ψ' ma skok na ściankach — tam potencjał jest nieskończony. W skończonej studni skok potencjału jest skończony, więc ψ' musi być ciągła. To właśnie ten dodatkowy warunek prowadzi do równań (9).

Oscylator harmoniczny

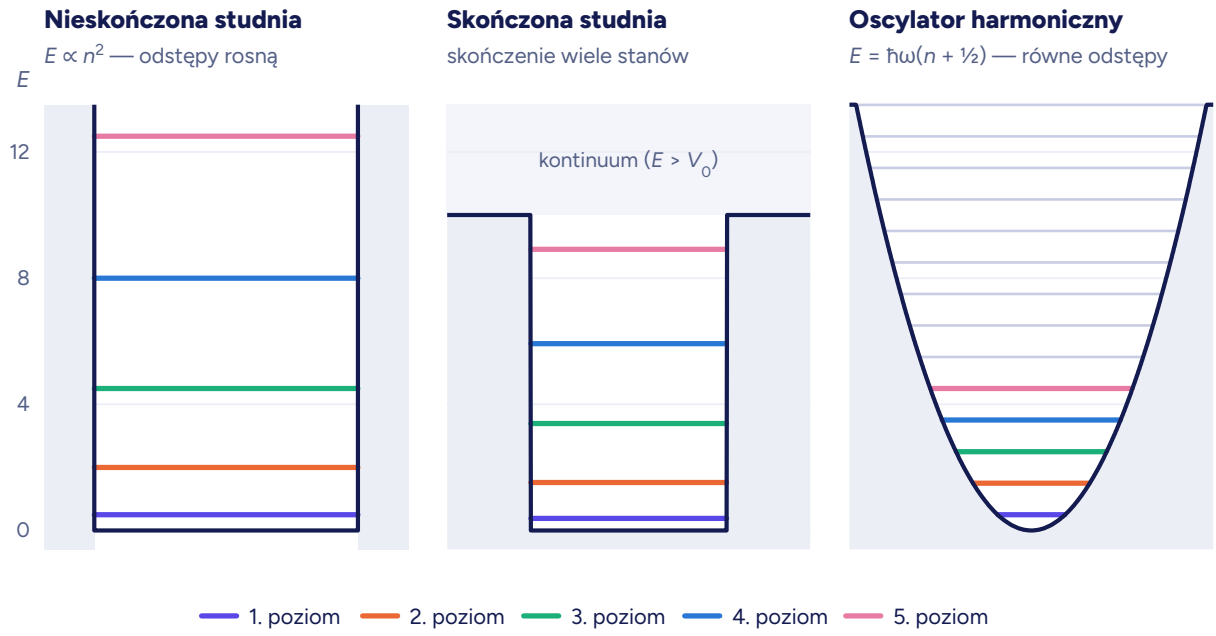
Potencjał $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ opisuje każdy układ wychylony niewiele z położenia równowagi: drgania atomów w cząsteczce, drgania sieci krystalicznej czy obwody elektryczne LC. Tu nie ma ścianek — jedynym warunkiem jest $\psi \to 0$ dla $|x| \to \infty$. Rozwiązania równania (2) są normowalne tylko wtedy, gdy

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{11}$$

Dla innych energii rozwiązanie rośnie w nieskończoności jak $e^{+m\omega x^2/2\hbar}$ i nie da się go unormować. Stan podstawowy to funkcja Gaussa, $\psi_0(x) \propto \exp\!\left(-m\omega x^2/2\hbar\right)$, a energia zerowa wynosi $\hbar\omega/2$.

RÓWNE ODSTĘPY

Poziomy oscylatora są **równoodległe**: $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$. W nieskończonej studni odstępy rosną jak $2n+1$. W skończonej studni też rosną, ale wolniej, bo wyższe stany głębiej wnikają w barierę — a nad krawędzią V_0 zaczyna się widmo ciągłe. To kształt potencjału decyduje o tym, jak wygląda widmo.



Rys. 4. Poziomy energii w trzech potencjałach o porównywalnej skali. Odcinki obejmują obszar klasycznie dozwolony, $V(x) \le E$.

OD OSCYLATORA DO KUBITU

Nadprzewodzący kubit typu *transmon* to w praktyce obwód LC — oscylator — z elementem nieliniowym (złączem Josephsona). Gdyby poziomy były równoodległe, impuls mikrofalowy wzbudzałby jednocześnie wszystkie przejścia. Niewielka **anharmoniczność** sprawia, że przejście $0 \to 1$ ma inną częstotliwość niż $1 \to 2$, więc dwa najniższe poziomy można traktować jako stany $|0\rangle$ i $|1\rangle$ kubitu.

Rozwiązanie numeryczne

Dla większości potencjałów równania (2) nie da się rozwiązać analitycznie. Wtedy dzielimy przedział na N punktów odległych o h i zastępujemy drugą pochodną ilorazem różnicowym:

$$\psi''(x_i) \approx \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2} \tag{12}$$

Warunki brzegowe $\psi_0 = \psi_{N+1} = 0$ wbudowujemy w macierz, a równanie różniczkowe zamienia się w zagadnienie własne macierzy trójdiagonalnej $H\vec{\psi} = E\vec{\psi}$. Wartości własne to poziomy energii, a wektory własne — funkcje falowe w punktach siatki. Błąd metody maleje jak h^2.

Spróbuj sam: w Eksploratorze zmieniaj parametry potencjału i obserwuj poziomy energii, a w Notatniku obliczeniowym napisz własny solver w Pythonie.

Najważniejsze

DO ZAPAMIĘTANIA

- Stacjonarne równanie Schrödingera $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V\psi = E\psi$ to równanie różniczkowe drugiego rzędu — zagadnienie własne hamiltonianu.
- Gdzie $E > V$, funkcja falowa oscyluje; gdzie $E < V$ — zanika wykładniczo.
- Warunki: ciągłość ψ, ciągłość ψ' (przy skończonym V), $\psi \to 0$ w nieskończoności, $\psi = 0$ gdzie $V = \infty$.
- **Kwantowanie energii jest skutkiem warunków brzegowych**, a nie dodatkowym postulatem.
- Nieskończona studnia: $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/(2mL^2)$, $n = 1, 2, \ldots$; n-ty stan ma $n-1$ węzłów.
- Skończona studnia: skończenie wiele stanów związanych (zawsze co najmniej jeden), niższe energie i tunelowanie pod barierę.
- Oscylator harmoniczny: $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ — poziomy równoodległe, energia zerowa $\hbar\omega/2$.

Słowniczek

Stan stacjonarny

stan o określonej energii; jego gęstość prawdopodobieństwa nie zmienia się w czasie.

Stan związany

stan o energii niższej niż potencjał w nieskończoności; funkcja falowa zanika daleko od studni i da się ją unormować.

Energia zerowa

najniższa możliwa energia układu kwantowego; zwykle większa od minimum potencjału.

Tunelowanie

niezerowe prawdopodobieństwo przebywania cząstki w obszarze klasycznie zabronionym lub przejścia przez barierę.

Warunek brzegowy

wymaganie nałożone na rozwiązanie równania różniczkowego na brzegach obszaru (np. $\psi(0) = 0$).

Węzeł

punkt wewnątrz obszaru, w którym funkcja falowa przechodzi przez zero.

Obszar klasycznie zabroniony

obszar, w którym $E < V$; klasyczna cząstka nie mogłaby się w nim znaleźć.

Normalizacja

wybór stałej tak, by całkowite prawdopodobieństwo wynosiło 1: $\int |\psi|^2\, dx = 1$.