

Schrödingerekvationen

19 okt. 2026, 5 min läsning

UTKAST

#fysik #kvantfysik #samband

Kurs: F0005T **Förkunskaper:** De Broglie-våglängd, Differentialekvationer

Newtons lagar fungerar inte för små partiklar med vågkaraktär, så vi behöver en ekvation som beskriver vågen i stället. Den tidsberoende Schrödingerekvationen gör det för tillstånd vars egenskaper inte ändras med tiden — stationära tillstånd — och skrivs kompakt som egenvärdesekvationen $\hat{H}\psi = E\psi$. Arbetsgången är alltid densamma: formulera ekvationen med rätt potential U , konstruera en lämplig ψ , bestäm ψ och E ur randvillkoren, normera.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Formeln, symbol för symbol

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2}}_{\text{rörelseenergi (krökningen)}} + \underbrace{U(x)\psi}_{\text{potentiell energi}} = \underbrace{E\psi}_{\text{total energi}}$$
$$\underbrace{\hat{H}}_{\text{Hamilton-operatorn}} \psi = \underbrace{E}_{\text{egenvärdet}} \psi$$

Ekvationen är energins bevarande, $K + U = E$, skriven för en våg: rörelseenergin sitter i hur mycket ψ kröker sig. Stor $E - U$ ger snabb svängning och kort våglängd, och där $E < U$ kröker sig ψ bort från axeln i stället för att svänga.

1. Varför en ny vågekvation?

För en våg på en sträng gäller $\omega = vk$: vinkelfrekvensen är proportionell mot vågtalet. För en fri partikel med $U = 0$ ger de Broglies samband $E = \hbar\omega$ och $p = \hbar k$ (se De Broglie-våglängd) tillsammans med $E = p^2/2m$ något annat:

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Här är ω proportionell mot k^2 . Den vanliga vågekvationen, med andraderivator i både x och t , kan inte ge det sambandet. Materievågens ekvation behöver en andraderivata i rummet men bara en förstaderivata i tiden.

2. Den tidsberoende Schrödingerekvationen

Den allmänna endimensionella ekvationen för en partikel med massan m i potentialen $U(x)$ är

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

Ekvationen kan inte härledas ur något mer grundläggande. Den motiveras av att den ger rätt samband för en fri partikel, och den accepteras för att dess förutsägelser stämmer med experimenten.

Motivering: varför i måste finnas med

Ansats. Pröva en sinusvåg för en fri partikel, $\Psi = A \cos(kx - \omega t) + B \sin(kx - \omega t)$, i en ekvation av formen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = C\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

med en okänd konstant C .

Vänsterledet. Två derivator i x ger faktorn $-k^2$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} [A \cos(kx - \omega t) + B \sin(kx - \omega t)]$$

Högerledet. En derivata i t :

$$C\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = C\hbar\omega [A \sin(kx - \omega t) - B \cos(kx - \omega t)]$$

Jämför. Med $\hbar\omega = \hbar^2 k^2 / 2m$ tar faktorerna framför ut varandra, och koefficienterna framför cosinus respektive sinus måste vara lika:

$$A = -CB \quad B = CA$$

$$A = -C^2 A \quad \Rightarrow \quad C^2 = -1 \quad \Rightarrow \quad C = i$$

Lösningen. $B = iA$ ger, med Eulers formel,

$$\Psi(x, t) = A [\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)] = A e^{i(kx - \omega t)}$$

Med potential. För denna våg är $-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi = K\Psi$ och $i\hbar \partial_t \Psi = E\Psi$. Läger vi till termen $U\Psi$ säger ekvationen alltså $K + U = E$, gånger Ψ .

Eftersom i står i ekvationen är lösningarna i allmänhet komplexa (se [Komplexa tal](#)). Det är bara $|\Psi|^2$ som går att mäta, se [Vågfunktion](#).

3. Stationära tillstånd

Ett tillstånd med bestämd energi E kan skrivas som en rumsdel gånger en ren tidsfas:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

Sätter vi in det i den tidsberoende ekvationen ger tidsderivatan faktorn $-iE/\hbar$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\psi(x) e^{-iEt/\hbar}] = i\hbar \left(-\frac{iE}{\hbar}\right) \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = E \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

Faktorn $e^{-iEt/\hbar}$ finns i alla termer och kan förkortas bort. Kvar blir den tidsberoende ekvationen i rutan överst. Sannolikhetstätheten beror inte på tiden, eftersom

$$|\Psi|^2 = \psi^* e^{+iEt/\hbar} \psi e^{-iEt/\hbar} = |\psi|^2$$

Det är därför tillståndet kallas *stationärt*. Det är fördelningen som står still, inte partikeln.

4. Lösningarnas form

Skriver vi den tidsberoende ekvationen som

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = -\frac{2m(E - U)}{\hbar^2} \psi$$

ser vi direkt hur lösningen beter sig i ett område där U är konstant:

Område	Lösning	Konstant
$E > U$, klassiskt tillåtet	$\psi = A \sin kx + B \cos kx$, svänger	$k = \frac{\sqrt{2m(E - U)}}{\hbar}$
$E < U$, klassiskt förbjudet	$\psi = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$, växer eller avtar	$\kappa = \frac{\sqrt{2m(U - E)}}{\hbar}$

Det förbjudna området behandlas i [Partikel i potentialbrunn](#) och [Kvantmekanisk tunnling](#). För en fri partikel är $\psi = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}$ med $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Det är två vågor som går åt var sitt håll, och med lika stora amplituder blir de tillsammans en stående våg.

Lösningarna måste också uppfylla några krav:

- ψ är kontinuerlig överallt.
- $d\psi/dx$ är kontinuerlig överallt där U är ändlig.
- $\psi = 0$ där $U = \infty$.
- ψ går att normera, alltså $\psi \rightarrow 0$ när $x \rightarrow \pm\infty$.

Kraven väljer ut vilka energier som är tillåtna. Ekvationen är dessutom linjär, så en summa av lösningar är också en lösning.

Vanliga fel

- **ψ tolkas som en förskjutning eller en bana.** Vågfunktionen svänger inte i rummet som en sträng. Bara $|\psi|^2$ har en fysikalisk tolkning.
- **Fel tecken på $E - U$.** Där $E < U$ blir lösningen exponentiell, inte en sinus. Kontrollera alltid tecknet innan du väljer ansats.
- **“Stationärt” tolkas som “i vila”.** Ett stationärt tillstånd har bestämd energi och en tidsberoende $|\Psi|^2$. Partikeln har ändå rörelseenergi.
- **h och $\hbar$ blandas.** $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ med $k = 2\pi/\lambda$ ger $E = h^2 / (2m\lambda^2)$. Skriver man h i stället för $\hbar$ blir svaret fel med en faktor $4\pi^2$.

5. Lösta exempel

Exempel – Fri elektron som stående våg

Visa att $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$ löser den tidsberoende Schrödingerekvationen med $U = 0$, och bestäm energin. Beräkna energin i eV för en elektron med våglängden 0,400 nm.

 Lösning

Derivera två gånger.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 A \sin kx - k^2 B \cos kx = -k^2 \psi$$

Sätt in. Med $U = 0$ blir vänsterledet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2 \psi) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi$$

Det är en konstant gånger ψ , så funktionen är en lösning med

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

Siffror.

$$E = \frac{(6,626 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \cdot (0,400 \cdot 10^{-9})^2} = 1,51 \cdot 10^{-18} \text{ J} \approx \boxed{9,40 \text{ eV}}$$

Fysika: Te ($\hbar$, m_e)

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

 Exempel – Elektron i ett klassiskt förbjudet område

En elektron med energin 2,00 eV kommer in i ett område där $U = 5,00$ eV. a) Visa att $\psi(x) = D e^{-\kappa x}$ löser den tidsberoende Schrödingerekvationen där, och bestäm κ . b) Hur långt in i området har $|\psi|^2$ sjunkit till 1,00 % av värdet vid gränsen?

 Lösning

a) Två derivator ger $\psi'' = \kappa^2 \psi$. Insatt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2\psi + U\psi = E\psi$$

$$\kappa^2 = \frac{2m(U - E)}{\hbar^2}$$

Med $U - E = 3,00 \text{ eV} = 4,806 \cdot 10^{-19} \text{ J}$:

$$\kappa = \frac{\sqrt{2 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \cdot 4,806 \cdot 10^{-19}}}{1,055 \cdot 10^{-34}} \approx \boxed{8,87 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}}$$

b) $|\psi|^2 \propto e^{-2\kappa x}$, så

$$e^{-2\kappa x} = 0,0100$$

$$x = \frac{\ln 100}{2\kappa} = \frac{4,605}{2 \cdot 8,874 \cdot 10^9} \approx \boxed{0,259 \text{ nm}}$$

Partikeln tränger alltså in ungefär en atomdiameter i ett område som den klassiskt aldrig kan nå.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

Läsning

- 40.1 Wave Functions and the One-Dimensional Schrödinger Equation