

Schrödinger ekvationen (partikel i låda)

Elias Almqvist

elalmqvist@gmail.com — <https://wych.dev>

Uppgiftbeskrivning (taget från dokumentet)

En partikel i en låda är en utav de första tillämpningarna man stöter på när man lär sig om kvantfysik. Man betraktar då en partikel (t.ex. en elektron) som befinner sig i en låda med oändligt höga väggar. För detta undersöker man partikelns vågfunktion $\psi_n(x)$. Vågfunktionen är i allmänhet en komplex funktion, dvs den har både en realdel och en imaginärdel. Vågfunktionens absolutbelopp i kvadrat, $|\psi_n(x)|^2$, representerar täthetsfunktionen för att partikeln skall finna sig vid läge x i lådan. Om partikeln befinner sig i ett så kallat energiegentillstånd så uppfyller den den tidsberoende Schrödingers ekvationen:

$$E_n \psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} \quad (1)$$

där E_n är partikelns energi, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ och m är partikelns massa. Att lådans väggar är oändligt höga innebär att vågfunktionen också behöver uppfylla randvillkoren:

$$\psi_n(0) = \psi_n(L) = 0 \quad \& \quad \psi'_n(0) = \psi'_n(L) = 0 \quad (2)$$

Slutligen, eftersom $|\psi_n(x)|^2$ motsvarar sannolikhetstätheten för att partikeln skall finna sig vid position x , så måste det gälla att:

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1.0 \quad (3)$$

Uppgifter

1. Hitta de olika möjliga värden på E_n , och hitta motsvarande vågfunktioner $\psi_n(x)$.
2. Visa grafer över motsvarande sannolikhetsfördelningar för att partikeln skall finna sig vid olika positioner x .
3. Partikelns fullständiga vågfunktion är egentligen även en funktion utav tiden. För en partikel som befinner sig i ett så kallat energiegentillstånd är den fullständiga vågfunktionen $\Psi_n(x, t) = \psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$. Dock innebär den extra faktorn $e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ inte någon intressant tidsutveckling av sannolikhetsfördelningen eftersom $|\Psi(x, t)|^2 = |\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|^2 = |\psi_n(x)|^2$. Intressantare blir det om en partikel befinner sig i en superposition av energiegentillstånd, tex:

$$\Psi(x, t) = A(\psi_1(x)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \psi_2(x)e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t})$$

För denna vågfunktion, *bestäm konstanten A sådan att:*

$$\int_0^L |\Psi(x, t)|^2 dx = 1.0$$

Undersök sedan hur sannolikheten att finna sig i den vänstra delen $0 < x < \frac{L}{2}$, respektive högra $\frac{L}{2} < x < L$ delen av lådan. Hitta alltså ett uttryck för:

$$P(V, t) = \int_0^{\frac{L}{2}} |\Psi_n(x, t)|^2 dx$$

$$P(H, t) = \int_{\frac{L}{2}}^L |\Psi_n(x, t)|^2 dx$$

4. Gör sedan samma sak för superpositionen av energiegentillstånden 1 och 3:

$$\Psi(x, t) = A \left(\psi_1(x)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \psi_3(x)e^{-i\frac{E_3}{\hbar}t} \right)$$

På vilket sätt skiljer de sig? Kan du förklara varför?

Uppgiftlösningar

1

Enligt Schrödingers ekvation får vi: $E_n \psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2}$ där $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ vilket vi kan substituera i ekvationen och vi får följande:

$$E_n \psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2}, \quad \left[\frac{\hbar}{2\pi} \right]$$
$$E_n \psi_n(x) = -\frac{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{d^2 \psi_n}{dx^2}\right)$$

där h är Plancks konstant och m är partikelns massa. Väljer därmed att förenkla uttrycket genom att byta ut konstanterna till en variabel (givet att $k = \frac{h^2}{8\pi^2 m}$):

$$E_n \psi_n(x) = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{d^2 \psi_n}{dx^2}\right), \quad \left[\frac{h^2}{8\pi^2 m} / k \right]$$
$$E_n \psi_n(x) = -k \left(\frac{d^2 \psi_n}{dx^2}\right), \quad +HL$$
$$E_n \psi_n(x) + k \left(\frac{d^2 \psi_n}{dx^2}\right) = 0$$

Väljer att skriva om differentialekvationen utan Leibniz notation och vi får:

$$E_n \psi_n + k \psi_n'' = 0, \quad /E_n$$
$$\psi_n'' + \frac{E_n}{k} \psi_n = 0$$

Vet att differentialekvationer av andra ordningen har lösningen $y = e^{\lambda x}$ och vi kan därmed beräkna λ för vår differentialekvation genom den karakteristiska ekvationen:

$$\lambda^2 + a\lambda + b = 0$$

där a och b är koefficienterna framför respektive "funktion". I vårt fall är $a = 0$ och $b = \frac{E_n}{k}$ och vi får därmed den karakteristiska ekvationen:

$$\lambda^2 + \frac{E_n}{k} = 0, \quad PQ$$
$$\lambda = \pm \sqrt{-\frac{E_n}{k}}$$
$$\lambda = \pm \sqrt{\frac{E_n}{k}} i$$

Då rötterna för den karakteristiska ekvationen är complexa ($\in \mathbb{C}$) får vi den *allmänna lösningen*:

$$\psi_n(x) = e^{ax} (C \cos bx + D \sin bx) \quad | \quad C, D \in \mathbb{R}, \quad \lambda = a + bi$$
$$\psi_n(x) = e^0 \left(C \cos \pm \sqrt{\frac{E_n}{k}} x + D \sin \pm \sqrt{\frac{E_n}{k}} x \right) = C \cos \left(\pm \sqrt{\frac{E_n}{k}} x \right) + D \sin \left(\pm \sqrt{\frac{E_n}{k}} x \right)$$

Schrödinger ekvationen lyder också att vågfunktionen skall följa både ekvation 2 och 3 vilket ger

$$\begin{cases} \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1.0 & |P(1) \\ \psi_n(0) = \psi_n(L) = 0 & |P(2) \\ \psi_n'(0) = \psi_n'(L) = 0 & |P(3) \end{cases}$$

Givet att $P(1)$ implicerar det att vågfunktion $\psi_n(x)$ area mellan 0 och L är 1 och $P(2)$ samt $P(3)$ gäller vilket ger att det är en stående våg och den har därmed ett visst antal våglängder (λ) i relation till antal noder (n).