

# 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:

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

*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:

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

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  $k = \frac{h^2}{8\pi^2 m}$ ):

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

Schrödingers 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 ( $\lambda$ ) i relation till antal noder ( $n$ ).