

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 Schrödinger 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:

$$\Psi_{1,2}(x, t) = A(\psi_1(x)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \psi_2(x)e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t})$$

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:

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

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

$$\psi_n(x) = e^{ax} (C \cos bx + D \sin bx) \quad | \quad C, D \in \mathbb{R}, \quad \lambda = a + bi$$

$$\psi_n(x) = e^0 \left(C \cos \pm \sqrt{\frac{E_n}{k}} x + D \sin \pm \sqrt{\frac{E_n}{k}} x \right)$$

$$\psi_n(x) = C \cos \left(\sqrt{\frac{E_n}{k}} x \right) + D \sin \left(\sqrt{\frac{E_n}{k}} x \right) \quad (4)$$

För att finna den *partikulära vågfunktionen* måste vi ta hänsyn till villkoren 2 och 3 vilket ger:

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

$P(2)$ och $P(3)$ lyder att sannolikheten att finna partikeln vid $x = 0$ eller $x = L$ är 0.0 vilket ger oss följande ekvation:

$$\begin{aligned}\psi_n(0) &= C \cos\left(\sqrt{\frac{E_n}{k}}0\right) + D \sin\left(\sqrt{\frac{E_n}{k}}0\right) = 0 \\ \psi_n(0) &= C \cos(0) + D \sin(0) = 0 \\ \implies \psi_n(0) &= D \sin(0) = 0 \implies C = 0\end{aligned}$$

Vi får därmed att $C = 0$ om $P(2)$ skall gälla! Väljer att byta ut k igen till dess ursprungliga uttryck och vi får:

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= D \sin\left(\sqrt{\frac{E_n}{k}}x\right), \quad \left[k/\frac{h^2}{8\pi^2 m}\right] \\ \psi_n(x) &= D \sin\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 m E_n}{h^2}}x\right)\end{aligned}$$

$P(2)$ lyder också att vågfunktionen skall vara 0 när $x = L$ och vi får därmed uttrycket:

$$\begin{aligned}\psi_n(L) &= D \sin\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 m E_n}{h^2}}L\right) = 0 \\ \implies \sqrt{\frac{8\pi^2 m E_n}{h^2}}L &= 0 + \eta\pi \quad | \quad \eta \in \mathbb{N}, \quad /L \\ \sqrt{\frac{8\pi^2 m E_n}{h^2}} &= \frac{\eta\pi}{L}\end{aligned}$$

Eftersom sannolikheten för att partikeln skall vara i lådan är alltid 1.0 ger oss följande villkor $P(1)$ [3] och vi behöver därmed *normalisera* vågfunktionen. Vi behöver alltså göra så att sannolikheten för att partikeln skall vara mellan $x = 0$ och $x = L$ är 1. Den är alltså alltid *i lådan*. D.v.s. följande:

$$\begin{aligned}\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx &= 1.0 \\ \implies |\psi_n(x)|^2 &= \left(D \sin\sqrt{\frac{8\pi^2 m E_n}{h^2}}x\right)^2 = D^2 \sin^2\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 m E_n}{h^2}}x\right), \quad \left[\sqrt{\frac{8\pi^2 m E_n}{h^2}}/\frac{\eta\pi}{L}\right] \\ |\psi_n(x)|^2 &= D^2 \sin^2\left(\frac{\eta\pi}{L}x\right) \\ \implies \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx &= D^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\eta\pi}{L}x\right) dx = 1.0\end{aligned}$$

Vi behöver nu beräkna integralen och få fram dess uttryck. Vi använder oss därmed av *u-substitution* och *trigonometriska ettan*. **Låt** $u = \frac{\eta\pi}{L}x$:

$$\begin{aligned}\int_0^L \sin^2\left(\frac{\eta\pi}{L}x\right) dx &= \int_0^L \sin^2(u) dx \\ \implies \frac{du}{dx} &= \frac{\eta\pi}{L} \implies dx = \frac{L}{\eta\pi} du \\ \implies \int_0^L \sin^2(u) dx &= \frac{L}{\eta\pi} \int_0^L \sin^2(u) du\end{aligned}$$

Väljer att **skriva om och förenkla** $\sin^2(u)$ och enligt den *trigonometriska ettan* får vi:

$$\begin{aligned}\cos(2u) &= 1 - 2\sin^2 u, \quad (\text{dubbla vinkeln för cosinus}), \quad +2\sin^2 u \\ \cos 2u + 2\sin^2 u &= 1, \quad -\cos 2u\end{aligned}$$

$$2 \sin^2 u = 1 - \cos 2u, \quad /2$$

$$\implies \sin^2 u = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos 2u$$

Vi kan nu stoppa in vår förenklade version av $\sin^2(u)$ med något vi faktiskt kan integrera:

$$\begin{aligned} \implies \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx &= D^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\eta\pi}{L}x\right) dx = D^2 \frac{L}{\eta\pi} \int_0^L \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(2u) \right\} du \\ &= D^2 \frac{L}{2\eta\pi} \int_0^L \{1 - \cos(2u)\} du = D^2 \frac{L}{2\eta\pi} \left(\int_0^L 1 du - \int_0^L \cos(2u) du \right) \\ &= D^2 \frac{L}{2\eta\pi} \left[u - \int \cos(2u) du \right]_0^L \end{aligned}$$

$$\mathbf{Låt} \mu = 2u$$

$$\implies \int \cos(2u) du = \int \cos(\mu) du$$

$$\implies \frac{d\mu}{du} = 2 \implies du = \frac{1}{2} d\mu$$

$$\int \cos(2u) du = \frac{1}{2} \int \cos(\mu) d\mu = -\frac{1}{2} \sin(\mu) + C$$

$$\implies \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = D^2 \frac{L}{2\eta\pi} \left[u - \int \cos(2u) du \right]_0^L = D^2 \frac{L}{2\eta\pi} \left[u + \frac{1}{2} \sin \mu \right]_0^L$$