

# 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  $\lambda$  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:

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

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

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

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:

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