

## Schrödingerekvationen och en potentialgrop

- Numeriska lösningar, analytiska lösningar av Schrödingerekvationen
- Kom ihåg: man byter mellan *Text Mode* (rak markör) och *Math Mode* (sned markör, streck-inrutad text) med F5.

Man skall först "nollställa":  
*restart;*

Nu provar vi. Det här är **tidsberoende Schrödingerekvationen**:

$$\text{Schrodinger} := \frac{d^2 \Psi}{dx^2} = c (V(x) - E) \Psi(x) :$$

Konstanten  $c$  är "2m/hstreck", ca 5.123e9.

Vi antar att energin  $E$  är positiv, men mindre än potentialgropshöjden  $V_0$ .

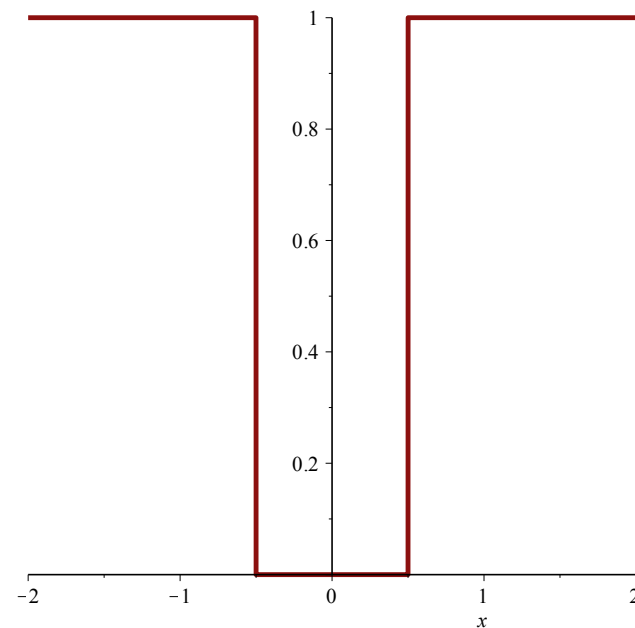
*assume* ( $E > 0$  and  $E < V_0$ ); *assume* ( $c > 0$ )

Vi antar att potentialen är bitvis konstant:

$$\text{potentiellenergi} := \begin{cases} 0 & x > -\frac{1}{2} \text{ and } x < \frac{1}{2} \\ V_0 & \text{otherwise} \end{cases} :$$

Den ser ut såhär:

*plot* (*subs* ( $V_0 = 1$ , *potentiellenergi*),  $x = -2..2$ , *thickness* = 3)



Nu löser vi Schrödingerekvationen i varje område för sig.

**Utanför potentialgropen:**

$\psi1 := \text{rhs}(\text{dsolve}(\text{subs}(V(x) = V_0, \text{Schrodinger})))$

$$_C1 e^{\sqrt{cV_0 - cE} x} + _C2 e^{-\sqrt{cV_0 - cE} x}$$

(1)

"dsolve" betyder "differential equation solve", och "rhs" är "right hand side" (HL, på svenska)

Maple kallar integrationskonstanterna  $_C1$  och  $_C2$ , vi skall ändra de namnen snart.

**Inne i potentialgropen:**

$\psi2 := \text{rhs}(\text{dsolve}(\text{subs}(V(x) = 0, \text{Schrodinger})))$

$$_C1 \sin(\sqrt{cE} x) + _C2 \cos(\sqrt{cE} x)$$

(2)

Vi kan sätta konstanterna i yttre regionerna till specialvärden. Vi kräver att vågfunktionen inte ökar långt bort från gropen.

$\psi a := \text{subs}(_C1 = c1, _C2 = 0, \psi1)$ ;

$\psi b := \text{subs}(_C1 = c2, _C2 = c3, \psi2)$ ;

$\psi c := \text{subs}(_C1 = 0, _C2 = c4, \psi1)$

$$c1 e^{\sqrt{cV_0 - cE} x} + c2 \sin(\sqrt{cE} x) + c3 \cos(\sqrt{cE} x) - c1 e^{-\sqrt{cV_0 - cE} x}$$

Nu skall vi klistra ihop de här tre lösningarna.  
Vi väljer jämn eller udda genom att sätta c2 eller c3 till noll.  
Det räcker först med att klistra ihop a och b:

`subs(x = -L/2, c2 = 0, psi_a = psi_b);`  
`clsoll := solve(% , c1);`

$$c1 e^{-\frac{1}{2} \sqrt{cV_0 - cE} L} = c3 \cos\left(-\frac{1}{2} \sqrt{cE} L\right) + \frac{c3 \cos\left(\frac{1}{2} \sqrt{cE} L\right)}{e^{-\frac{1}{2} \sqrt{cV_0 - cE} L}}$$

samt a och b:s derivator:

`subs(x = -L/2, c2 = 0, d/dx psi_a = d/dx psi_b);`  
`clsol2 := solve(% , c1)`

$$c1 \sqrt{cV_0 - cE} e^{-\frac{1}{2} \sqrt{cV_0 - cE} L} = -c3 \sin\left(-\frac{1}{2} \sqrt{cE} L\right) \sqrt{cE} + \frac{c3 \sin\left(\frac{1}{2} \sqrt{cE} L\right) \sqrt{cE}}{\sqrt{cV_0 - cE} e^{-\frac{1}{2} \sqrt{cV_0 - cE} L}}$$

`eq3 := clsoll / clsol2 = 1`

$$\frac{\cos\left(\frac{1}{2} \sqrt{cE} L\right) \sqrt{cV_0 - cE}}{\sin\left(\frac{1}{2} \sqrt{cE} L\right) \sqrt{cE}} = 1$$

Det ser lite snyggare ut om man skriver den som cotangens och delar bort ett "c":

$$\frac{\cos\left(\frac{1}{2} \sqrt{cE} L\right) \sqrt{cV_0 - cE}}{\sin\left(\frac{1}{2} \sqrt{cE} L\right) \sqrt{cE}} = 1$$

`simplify(convert(eq3, cot));`

$$\frac{\cot\left(\frac{1}{2} \sqrt{cE} L\right) \sqrt{cV_0 - cE}}{\sqrt{cE}} = 1 \quad (9)$$

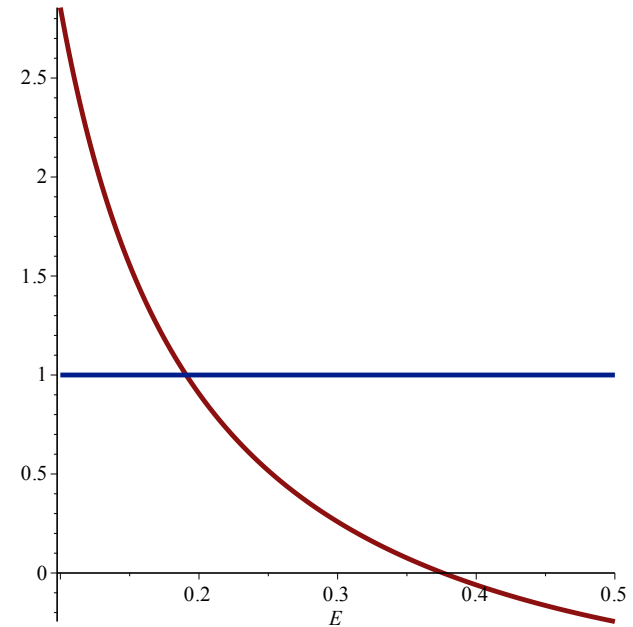
Nu stoppar vi in värden, värdet på c har vi ovan:

`eq4 := subs(V0 = 1, sqrt(c) = 5.123 * 10^9, L = 10^-9, %)`

$$\frac{\cot(2.561500000 \sqrt{E}) \sqrt{1 - E}}{\sqrt{E}} = 1 \quad (10)$$

Vi kan hitta en grafisk lösning när vänsterledet korsar den konstanta linjen 1.

`plot([lhs(eq4), 1], E = 0.1 .. 0.5, thickness = 3);`



Man kan också räkna ut det direkt med `fsolve`:

`fsolve(eq4)`

0.1907692298

(11)

Det här ger ett av energivärdena, i elektronvolt. Beroende på vad  $V_0$  är finns det olika många lösningar.

Vi har hittat energinivå från Schrödingerekvationen för (ändlig) potentialgrop!

Jämför appen "Bound states" från PhET.