

# Partikel i låda

19 okt. 2026, 5 min läsning

UTKAST

#fysik #kvantfysik #modell

**Kurs:** F0005T **Förkunskaper:** Schrödingerekvationen, Vågfunktion, Stående våg

Den enklaste bundna kvantmekaniska modellen: en partikel instängd mellan 0 och  $L$  med  $U = 0$  inuti och oändligt utanför, användbar som modell för en elektron i en linjär molekyl eller i en tunn metalltråd. Randvillkoren  $\psi(0) = \psi(L) = 0$  tvingar lösningen att bli en sinus med ett helt antal halva våglängder i lådan — precis som en stående våg på en sträng — och ur det följer kvantiserade energinivåer. Nivån  $n = 1$  har inte energin noll trots att  $U = 0$  i lådan, och antalet bukar i  $\psi$  ger kvanttalet  $n$  direkt.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Fysika: Fd3 (fri partikel i endimensionell låda, med  $a$  för lådans storlek)

## Formeln, symbol för symbol

$$\psi_n(x) = \underbrace{\sqrt{\frac{2}{L}}}_{\text{normering}} \sin \underbrace{\frac{n\pi x}{L}}_{\substack{n \text{ halva våg-} \\ \text{längder i lådan}}}$$
$$E_n = \underbrace{n^2}_{\substack{\text{kvanttalet} \\ \text{i kvadrat}}} \cdot \underbrace{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}}_{E_1, \text{grundnivån}}$$

Randvillkoren låter bara ett helt antal halva våglängder få plats, så  $\lambda_n = 2L/n$ . Kortare våglängd betyder större rörelsemängd, och eftersom all energi är kinetisk växer den som  $n^2$  — och blir större ju trängre lådan är.

## 1. Potentialen och randvillkoren

Potentialen är

$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ \infty & \text{annars} \end{cases}$$

Där  $U = \infty$  måste  $\psi = 0$ , annars blir termen  $U\psi$  i **Schrödingerekvationen** oändlig. Eftersom  $\psi$  ska vara kontinuerlig ger det randvillkoren

$$\psi(0) = 0 \quad \psi(L) = 0$$

Klassiskt studsar partikeln fram och tillbaka med konstant fart. Den kan ha vilken energi som helst, även noll, och den är lika sannolik att finnas överallt i lådan.

## 2. Lösningen

Inne i lådan är  $U = 0$ , så ekvationen är densamma som för en fri partikel. Randvillkoren väljer ut vilka lösningar som är tillåtna.

### Härledning av vågfunktioner och energinivåer

**Ekvationen i lådan.**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

**Allmän lösning.** Två motriktade vågor med  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Med Eulers formel:

$$\psi(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} = (A_1 + A_2) \cos kx + i(A_1 - A_2) \sin kx$$

**Vänster vägg.**  $\psi(0) = A_1 + A_2 = 0$  ger  $A_2 = -A_1$ . Då försvinner cosinustermen:

$$\psi(x) = 2iA_1 \sin kx = C \sin kx$$

**Höger vägg.**  $\psi(L) = C \sin kL = 0$  med  $C \neq 0$  kräver

$$kL = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$n = 0$  ger  $\psi \equiv 0$ , alltså ingen partikel, och negativa  $n$  ger samma tillstånd med omvänt tecken.

**Våglängd och rörelsemängd.**

$$\lambda_n = \frac{2\pi}{k} = \frac{2L}{n} \quad p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{nh}{2L}$$

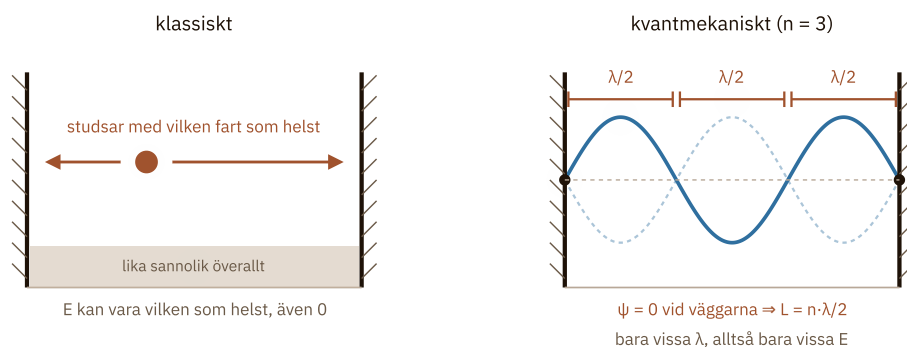
Fysika: Fd3 (de Broglie-våglängden)

**Energin.** All energi är kinetisk:

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Lådan rymmer alltså ett helt antal halva våglängder, precis som en **stående våg** på en sträng som sitter fast i båda ändar:

$$L = n \frac{\lambda_n}{2}$$



Klassiskt kan partikeln studsas mellan väggarna med vilken fart som helst och är lika sannolik överallt. Kvantmekaniskt måste  $\psi$  vara noll vid båda väggarna, så bara ett helt antal halva våglängder rymms – här  $n = 3$  – och därmed bara vissa energier.

### 3. Normering

Konstanten  $C$  bestäms av normeringsvillkoret i **Vågfunktion**. Med  $\sin^2 u = (1 - \cos 2u)/2$ :

$$\int_0^L C^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = C^2 \left[ \frac{x}{2} - \frac{L}{4n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{L} \right]_0^L = C^2 \frac{L}{2}$$

$$C^2 \frac{L}{2} = 1 \quad \Rightarrow \quad C = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

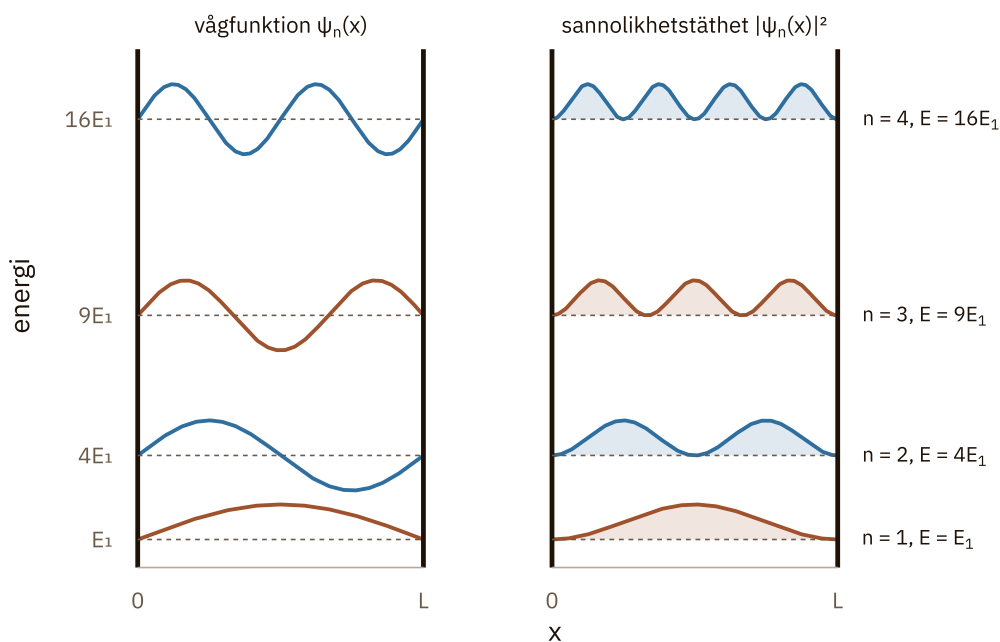
vilket är amplituden i rutan överst. Till skillnad från en sträng, där amplituden beror på hur man satte igång svängningen, är  $C$  här helt bestämd.

## 4. Energinivåerna

Med grundnivån  $E_1 = h^2/(8mL^2)$  är  $E_n = n^2 E_1$ . Nivåerna glesnar alltså uppåt:

$$E_{n+1} - E_n = (2n + 1) E_1$$

- **Energien är aldrig noll.** Den lägsta energin är  $E_1 > 0$ . Partikeln är instängd på sträckan  $L$ , så  $\Delta x \leq L$ , och då kan inte rörelsemängden vara exakt noll enligt **Heisenbergs osäkerhetsprincip**.
- **Mindre låda ger högre energier.**  $E_n \propto 1/L^2$ . Därför lyser små halvledarkristaller blåare än stora.
- **Tyngre partikel ger tätare nivåer.**  $E_n \propto 1/m$ . För makroskopiska föremål ligger nivåerna så tätt att kvantiseringen inte märks.
- **Fotoner.** Vid ett hopp från  $n_i$  till  $n_f$  sänds en **foton** ut med  $hc/\lambda = E_{n_i} - E_{n_f} = (n_i^2 - n_f^2)E_1$ .



De fyra lägsta tillstånden, ritade på sina energinivåer. Vänster:  $\psi_n$  har  $n$  bukar och  $n - 1$  noder inne i lådan. Höger: sannolikhetstätheten  $|\psi_n|^2$  är noll vid väggarna och i noderna.

## 5. Sannolikhetsfördelningen

Sannolikhetstätheten  $|\psi_n|^2 = (2/L) \sin^2(n\pi x/L)$  är inte jämn som i det klassiska fallet. I grundtillståndet är partikeln oftast nära mitten. I  $n = 2$  är tätheten noll just i mitten. Sannolikheten för ett intervall får vi genom att integrera som i avsnitt 3:

$$P(a \leq x \leq b) = \left[ \frac{x}{L} - \frac{1}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{L} \right]_a^b$$

För stora  $n$  svänger tätheten så snabbt att medelvärdet över ett intervall går mot det klassiska  $1/L$ . Så övergår kvantmekaniken i klassisk mekanik.

Den fullständiga tidsberoende vågfunktionen är  $\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$ . Tidsfaktorn försvinner i  $|\Psi_n|^2$ , så tillstånden är stationära.

### ⚠ Vanliga fel

- **$n = 0$  tas med.** Den lägsta nivån är  $n = 1$ .  $n = 0$  ger  $\psi \equiv 0$  och ingen partikel alls.
- **Nivåerna tros ligga på jämnt avstånd.**  $E_n \propto n^2$ , så  $E_2 = 4E_1$ , inte  $2E_1$ .
- **Fel antal noder.**  $\psi_n$  har  $n$  bukar och  $n - 1$  noder *inne i lådan*, plus noderna vid väggarna.
- **$h$  och  $\hbar$  blandas.**  $E_n = n^2 h^2 / (8mL^2) = n^2 \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$ . En blandning ger fel med en faktor  $4\pi^2$ .
- **Energi i joule jämförs med eV.** Räkna om med  $1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$  innan fotonvåglängden beräknas med  $hc = 1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}$ .

## 6. Lösta exempel

### ≡ Exempel – Elektron i en 1,00 nm lång molekyll

En elektron kan röra sig fritt längs en rak molekyll med längden 1,00 nm och modelleras som en partikel i en låda. a) Beräkna de tre lägsta energinivåerna i eV. b) Beräkna våglängden hos fotonen som sänds ut vid övergången  $n = 3 \rightarrow 1$  och vid  $n = 2 \rightarrow 1$ .

### ✎ Lösning

a) Grundnivån:

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} = \frac{(6,626 \cdot 10^{-34})^2}{8 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \cdot (1,00 \cdot 10^{-9})^2} = 6,02 \cdot 10^{-20} \text{ J} = \boxed{0,376 \text{ eV}}$$

Fysika:  $Te (\hbar, m_e)$

$$E_2 = 4E_1 = \boxed{1,50 \text{ eV}} \quad E_3 = 9E_1 = \boxed{3,38 \text{ eV}}$$

b) Övergången  $3 \rightarrow 1$  har  $\Delta E = 8E_1 = 3,008 \text{ eV}$ :

$$\lambda_{31} = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{3,008 \text{ eV}} \approx \boxed{412 \text{ nm}}$$

Övergången  $2 \rightarrow 1$  har  $\Delta E = 3E_1 = 1,128 \text{ eV}$ :

$$\lambda_{21} = \frac{1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{1,128 \text{ eV}} \approx \boxed{1,10 \text{ } \mu\text{m}}$$

Den första ligger i det violetta, den andra i det infraröda.

*Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.*

### ☰ Exempel – Mittersta tredjedelen av lådan

En partikel i en låda med bredden  $L$  är i tillståndet  $n = 1$  respektive  $n = 2$ . Beräkna i båda fallen sannolikheten att hitta partikeln i den mittersta tredjedelen,  $L/3 \leq x \leq 2L/3$ , och jämför med det klassiska värdet.

#### Lösning

**Formeln.** Med  $P = [x/L - \sin(2n\pi x/L)/(2n\pi)]_{L/3}^{2L/3}$  blir första termen alltid  $1/3$ .

$n = 1$ .  $\sin(4\pi/3) = -\sqrt{3}/2$  och  $\sin(2\pi/3) = \sqrt{3}/2$ :

$$P_1 = \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi} \left( -\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \right) = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \approx \boxed{0,609}$$

$n = 2$ .  $\sin(8\pi/3) = \sqrt{3}/2$  och  $\sin(4\pi/3) = -\sqrt{3}/2$ :

$$P_2 = \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi} \left( \frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} \right) = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \approx \boxed{0,196}$$

**Jämförelse.** Klassiskt är sannolikheten  $1/3 \approx 0,333$ . Grundtillståndet samlar partikeln i mitten, medan  $n = 2$  har en nod där och trycker ut partikeln mot sidorna.

*Ej kontrollerat mot facit — två oberoende lösningar stämmer överens.*

## Läsning

- 40.2 Particle in a Box