

Partikel i potentialbrunn

19 okt. 2026, 6 min läsning

UTKAST

#fysik #kvantfysik #modell

Kurs: F0005T Förkunskaper: Partikel i låda

Med en ändlig vägghöjd U_0 i stället för oändlig blir ψ en sinusvåg inne i brunnen och en avtagande exponentialfunktion utanför, en på var sida. Lösningarna måste matchas så att både ψ och $d\psi/dx$ är kontinuerliga över randerna, vilket kräver numerik – det finns inga enkla uttryck. Tre skillnader mot den oändliga lådan följer: ψ är inte noll vid randerna, så våglängden blir längre och energinivåerna därmed lägre; antalet bundna nivåer är ändligt med ett kontinuum ovanför U_0 ; och vågfunktionen är inte noll utanför brunnen, så partikeln har en sannolikhet att befinna sig där klassisk fysik förbjuder den.

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi(x) \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$$

Formeln, symbol för symbol

$$\underbrace{\frac{d^2\psi}{dx^2}}_{\text{krökningen}} = \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}_{\kappa^2 > 0 \text{ utanför brunnen}} \psi$$

$$\psi(x) = \underbrace{Ce^{\kappa x}}_{\text{växer; stryks för } x > L} + \underbrace{De^{-\kappa x}}_{\text{avtar; stryks för } x < 0}$$

Utanför brunnen böjer sig ψ bort från axeln i stället för mot den. Då kan den inte svänga utan bara växa eller avta exponentiellt, och bara den avtagande delen går att normera. Partikeln når därför en bit, ungefär $1/\kappa$, in i väggen.

1. Tre områden

Brunnen har $U = 0$ för $0 < x < L$ och $U = U_0$ utanför. Vi söker **bundna** tillstånd, alltså $0 < E < U_0$. Då delas x -axeln i tre områden där **Schrödingerekvationen** har olika karaktär.

Inne i brunnen. Med $U = 0$ är ekvationen densamma som i **den oändliga lådan**:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

Utanför brunnen. Här är $U_0 - E > 0$, och ekvationen i rutan överst ger exponentialfunktioner med

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

Fysika: Fd3 (samma κ som under tunneleffekt)

Vågfunktionen måste gå att normera, så den får inte växa när $|x| \rightarrow \infty$. För $x < 0$ stryks därför termen $De^{-\kappa x}$, och för $x > L$ stryks $Ce^{\kappa x}$:

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} \quad (x < 0) \quad \psi(x) = De^{-\kappa x} \quad (x > L)$$

2. Anslutningsvillkoren

Enligt Schrödingerekvationen är $\psi'' \propto (U - E)\psi$. Potentialen gör ett ändligt hopp vid randen, så ψ'' gör också bara ett ändligt hopp. Då är $d\psi/dx$ kontinuerlig, och därmed också ψ . Det ger fyra villkor, två vid varje rand:

$$\psi \text{ och } \frac{d\psi}{dx} \text{ kontinuerliga vid } x = 0 \text{ och } x = L$$

Villkoren går bara att uppfylla för vissa E , och det är så kvantiseringen uppstår. Villkoret $\psi = 0$ vid väggarna gäller inte längre.

Härledning av kvantiseringsvillkoret

Flytta origo till mitten. Brunnen ligger nu på $-L/2 < x < L/2$. Potentialen är symmetrisk, så tillstånden är antingen jämna, $\psi = \cos kx$ inuti, eller udda, $\psi = \sin kx$ inuti. Utanför höger rand är $\psi \propto e^{-\kappa x}$.

Kvoten ψ'/ψ vid $x = L/2$. Båda villkoren vid randen kan slås ihop till att ψ'/ψ ska vara lika på båda sidor. Utanför är kvoten $-\kappa$.

Jämna tillstånd:

$$\frac{-k \sin(kL/2)}{\cos(kL/2)} = -\kappa \quad \Rightarrow \quad k \tan \frac{kL}{2} = \kappa$$

Udda tillstånd:

$$\frac{k \cos(kL/2)}{\sin(kL/2)} = -\kappa \quad \Rightarrow \quad -k \cot \frac{kL}{2} = \kappa$$

Dimensionslösa variabler. Inför $z = kL/2$ och

$$z_0 = \frac{L}{2} \cdot \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}$$

Eftersom $k^2 + \kappa^2 = 2mU_0/\hbar^2$ blir $\kappa L/2 = \sqrt{z_0^2 - z^2}$, och villkoren blir

$$z \tan z = \sqrt{z_0^2 - z^2} \quad (\text{jämna}) \quad -z \cot z = \sqrt{z_0^2 - z^2} \quad (\text{udda})$$

Det är transcendent ekvationer. De löses grafiskt eller numeriskt, inte med en formel.

Koppling till den oändliga brunnen. Med $E_{1\text{-IDW}} = \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$, grundnivån i en oändlig brunn med samma bredd, är

$$\frac{E}{E_{1\text{-IDW}}} = \left(\frac{2z}{\pi}\right)^2 \quad z_0 = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{U_0}{E_{1\text{-IDW}}}}$$

Gränsen $U_0 \rightarrow \infty$ ger $z_0 \rightarrow \infty$, och då ligger lösningarna vid $z = \pi/2, \pi, 3\pi/2, \dots$, vilket ger $E = n^2 E_{1\text{-IDW}}$ som i den oändliga lådan.

3. Antalet bundna tillstånd

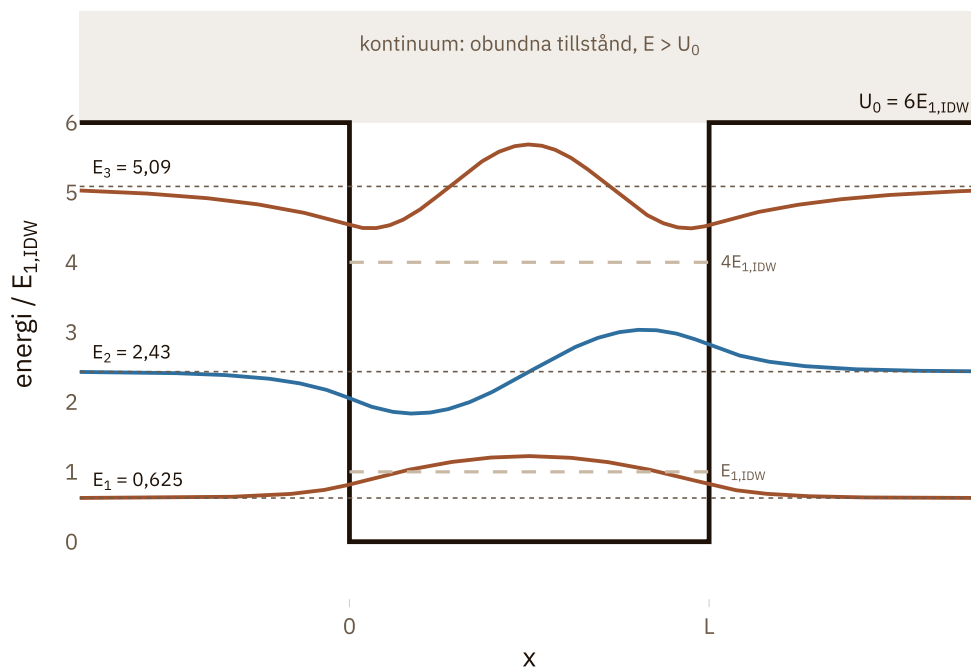
Vänsterleden $z \tan z$ och $-z \cot z$ går växelvis från 0 till ∞ på varje intervall av längden $\pi/2$, medan högerledet avtar från z_0 till 0 på $0 \leq z \leq z_0$. Varje påbörjat intervall ger därför exakt en lösning, och antalet bundna tillstånd blir

$$N = \lceil \sqrt{\frac{U_0}{E_{1-IDW}}} \rceil$$

där $\lceil \cdot \rceil$ betyder avrundning uppåt till heltal. En brunn har alltså alltid **minst ett** bundet tillstånd, hur grund den än är.

Brunnen med $U_0 = 6E_{1-IDW}$. Här är $\sqrt{6} = 2,45$, så $N = 3$. Numerisk lösning av villkoren ger

n	E_n/E_{1-IDW}	E_n/U_0	oändlig brunn, n^2
1	0,625	0,104	1
2	2,43	0,406	4
3	5,09	0,848	9



De tre bundna tillstånden i en brunn med $U_0 = 6E_{1-IDW}$, ritade på sina energinivåer. Vågfunktionerna är inte noll vid randerna utan klingar av exponentiellt utanför brunnen. Den oändliga brunnens nivåer E_{1-IDW} och $4E_{1-IDW}$ (streckade) ligger högre, och dess nivå $9E_{1-IDW}$ finns inte alls bland de bundna. Övanför U_0 är energin inte kvantiserad.

4. Jämförelse med den oändliga brunnen

	oändlig brunn	ändlig brunn
ψ vid randen	0	skild från 0
ψ utanför	0	$\propto e^{-\kappa x }$
antal bundna nivåer	oändligt många	N , alltid minst 1
nivåerna	$n^2 E_{1-IDW}$	lägre än $n^2 E_{1-IDW}$
över brunnskanten	finns inte	kontinuum för $E > U_0$

Nivåerna ligger lägre eftersom ψ får sticka ut en bit utanför. Vågen får plats med en längre våglängd, och längre våglängd betyder mindre rörelsemängd och därmed lägre energi. Skillnaden är störst för de högsta nivåerna, som ligger närmast kanten.

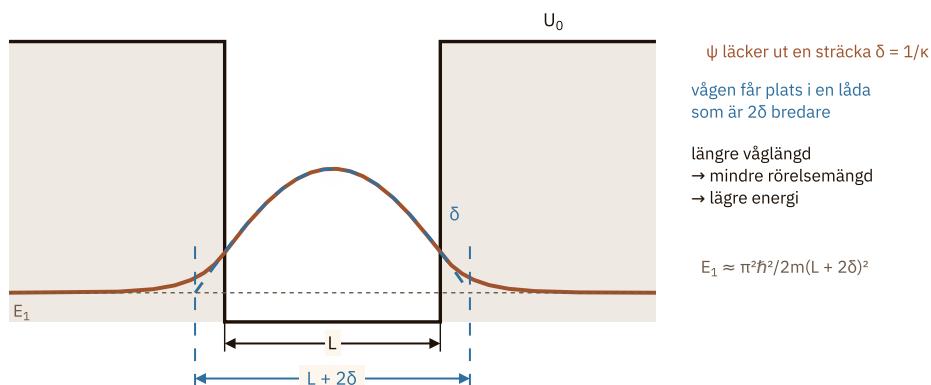
5. Inträngningsdjupet

Utanför brunnen avtar sannolikhetstätheten som $|\psi|^2 \propto e^{-2\kappa|x|}$ räknat från randen. Ett mått på hur långt ut partikeln når är längden där ψ har minskat med faktorn e :

$$\delta = \frac{1}{\kappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

Nivåer nära kanten har litet $U_0 - E$ och tränger därför längst ut. Klassiskt är området utanför förbjudet, eftersom den kinetiska energin $E - U_0$ där skulle vara negativ. Är barriären tunn jämfört med δ kan partikeln ta sig igenom, vilket är **tunnling**.

En användbar tumregel är att den ändliga brunnen beter sig ungefär som en oändlig brunn med den **effektiva bredden** $L + 2\delta$.



Grundtillståndet i en brunn med $U_0 = 6E_{1-IDW}$ (heldraget) och en halv sinusvåg i en oändlig låda med bredden $L + 2\delta$ (streckat). Inne i brunnen går de knappt att skilja åt: vågen beter sig som om väggarna stod δ längre ut, och därför ligger nivån lägre.

⚠ Vanliga fel

- κ räknas med U_0 i stället för $U_0 - E$. Avklingningen bestäms av hur långt under kanten nivån ligger, inte av brunnsdjupet ensamt.
- Den oändliga brunnens formel används för de exakta nivåerna. $n^2 E_{1-IDW}$ är en övre gräns, inte svaret. De exakta nivåerna kräver numerisk lösning.
- $\psi = 0$ sätts vid randen. Det gäller bara när väggen är oändligt hög. I den ändliga brunnen är det ψ och $d\psi/dx$ som ska vara kontinuerliga.
- Energin räknas från fel nollnivå. E mäts från brunnens botten, och ett tillstånd är bundet bara om $E < U_0$.
- En grund brunn tros sakna bundna tillstånd. Det finns alltid minst ett, i en endimensionell brunn.

6. Lösta exempel

☰ Exempel – Grund brunn för en elektron

En elektron befinner sig i en ändlig brunn med bredden 0,500 nm och djupet 5,00 eV. a) Hur många bundna tillstånd finns? b) En numerisk lösning ger grundnivån 0,814 eV. Bestäm inträngningsdjupet $1/\kappa$ för grundtillståndet. c) Uppskatta grundnivån som en oändlig brunn med den effektiva bredden $L + 2/\kappa$, och jämför med det exakta värdet.

✎ Lösning

a) Den oändliga brunnens grundnivå:

$$E_{1-IDW} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} = \frac{\pi^2 (1,055 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \cdot (0,500 \cdot 10^{-9})^2} \text{ J} = 1,504 \text{ eV}$$

Fysika: Fd3 (partikel i endimensionell låda, E_n med $n = 1$) och Te ($\hbar$, m_e)

$$\sqrt{\frac{U_0}{E_{1-IDW}}} = \sqrt{\frac{5,00}{1,504}} = \sqrt{3,32} = 1,82 \quad \Rightarrow \quad \boxed{N = 2}$$

$$\text{b) } U_0 - E = 4,186 \text{ eV} = 6,71 \cdot 10^{-19} \text{ J:}$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \cdot 6,71 \cdot 10^{-19}}}{1,055 \cdot 10^{-34}} = 1,05 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

$$\frac{1}{\kappa} = \boxed{0,0954 \text{ nm}}$$

Elektronen når alltså ungefär en femtedel av brunnsbredden ut på varje sida.

$$\text{c) Effektiv bredd } L_{\text{eff}} = 0,500 + 2 \cdot 0,0954 = 0,691 \text{ nm. Energien skalar som } 1/L^2:$$

$$E_1 \approx E_{1\text{-IDW}} \left(\frac{L}{L_{\text{eff}}} \right)^2 = 1,504 \cdot \left(\frac{0,500}{0,691} \right)^2 \approx \boxed{0,788 \text{ eV}}$$

Det exakta värdet är 0,814 eV, så uppskattningen ligger ungefär 3 % fel. Den oändliga brunnen hade gett 1,50 eV, nästan dubbelt så mycket.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

≡ Exempel – Hur djup för tre nivåer?

En elektron sitter i en ändlig brunn med bredden 0,300 nm. Inom vilket intervall ska brunnsdjupet U_0 ligga för att det ska finnas exakt tre bundna tillstånd? Hur många bundna tillstånd finns det om $U_0 = 25,0 \text{ eV}$?

Lösning

Grundenheten.

$$E_{1\text{-IDW}} = \frac{\pi^2 (1,055 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \cdot (0,300 \cdot 10^{-9})^2} \text{ J} = 4,18 \text{ eV}$$

Villkoret. $N = 3$ kräver $2 < \sqrt{U_0/E_{1\text{-IDW}}} \leq 3$, alltså

$$4E_{1\text{-IDW}} < U_0 \leq 9E_{1\text{-IDW}} \quad \Rightarrow \quad \boxed{16,7 \text{ eV} < U_0 \leq 37,6 \text{ eV}}$$

$$U_0 = 25,0 \text{ eV.}$$

$$\sqrt{\frac{25,0}{4,18}} = 2,45 \quad \Rightarrow \quad \boxed{N = 3}$$

Numerisk lösning ger nivåerna 2,61, 10,2 och 21,2 eV, alla under motsvarande 4,18, 16,7 och 37,6 eV i den oändliga brunnen.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

Läsning

- 40.3 Potential Wells