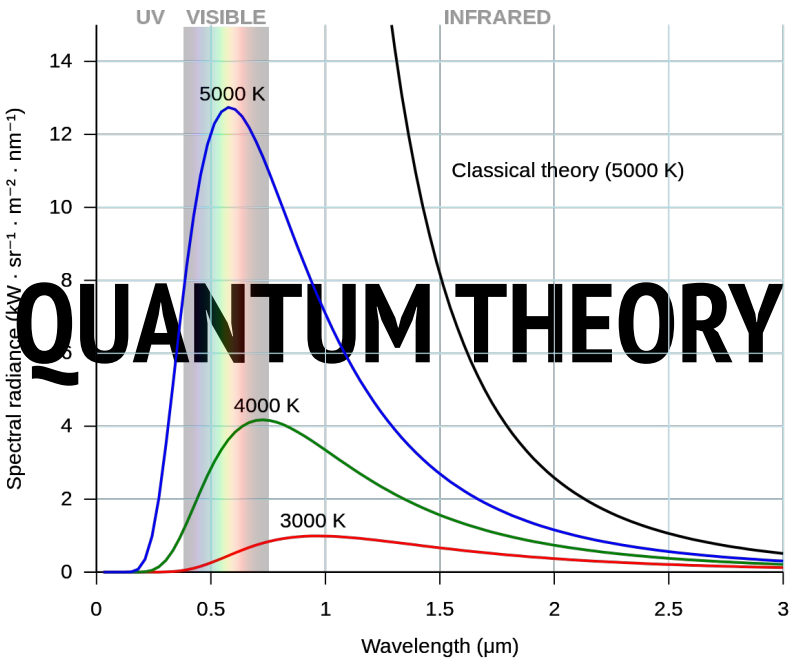
Particle-in-a-box model on MS Excel

How to solve Schrödinger's function without differential equations?

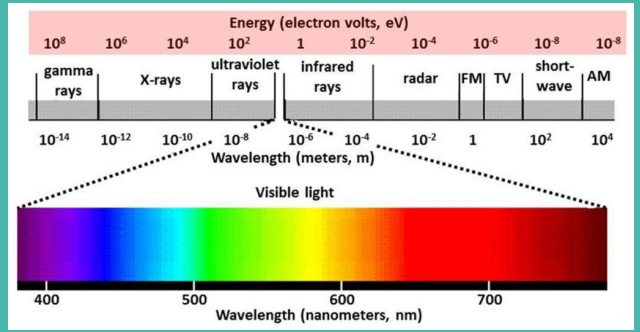
Leyre Falcón Martínez

INTRODUCTION



QUANTUM THEORY

- Electromagnetic spectra



- Planck hypothesis

Planck's Equation

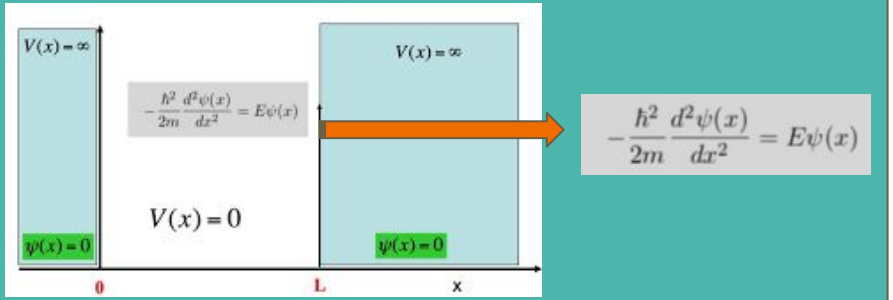
$$E = h\nu$$

- Schrödinger's model

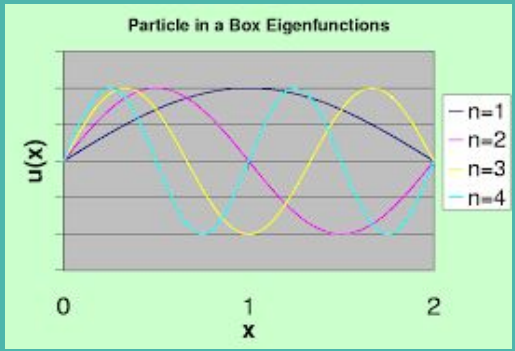
$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

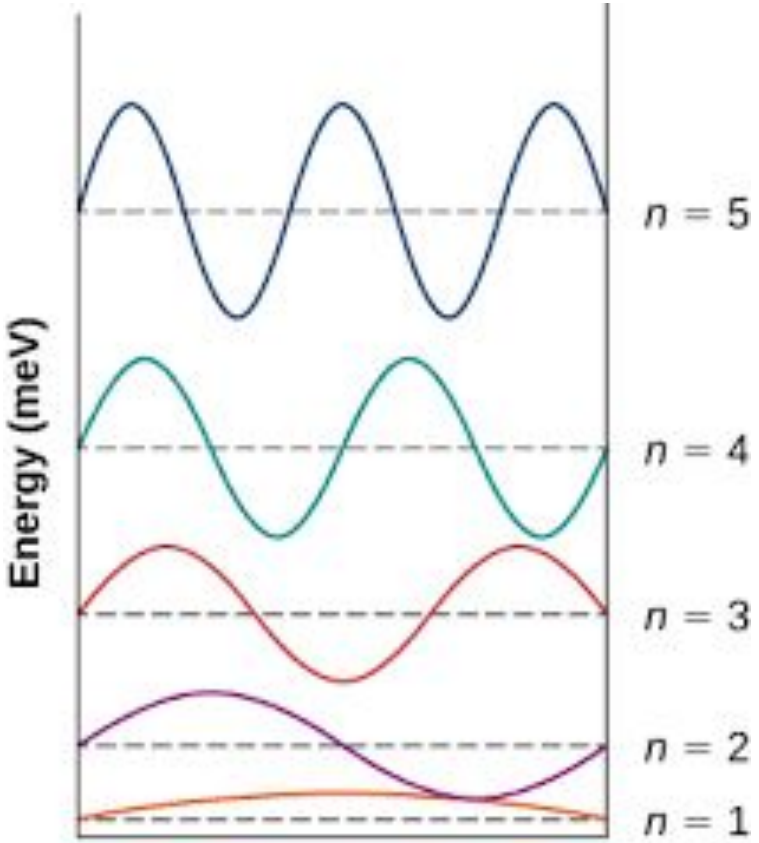
Particle in a box

- Movement of a particle
- Model of the particle in a one-dimensional box



- Orbitals and quantization





MS EXCEL EXPLANATION

THEORY

Schrödinger equation

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\,\psi(x)$$

0

Central numerical derivate on Schrödinger's equation

- Central numerical derivate

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\Delta x)-f(x-\Delta x)}{2\Delta x}$$

- Variable change $\Delta x = \frac{h}{2}$
- Central numerical double derivate

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2}[f(x+h)-2f(x)+f(x-h)]$$

$$f''_i = \frac{1}{h^2}(f_{i+1}-2f_i+f_{i-1})$$

- Final equation

$$\Psi_i'' = 2(V_i-E)\Psi_i = \frac{1}{h^2}(\Psi_{i+1}-2\Psi_i+\Psi_{i-1})$$

$$\Psi_{i+1} = 2\Psi_i[1+(V_i-E)h^2]-\Psi_{i-1}$$

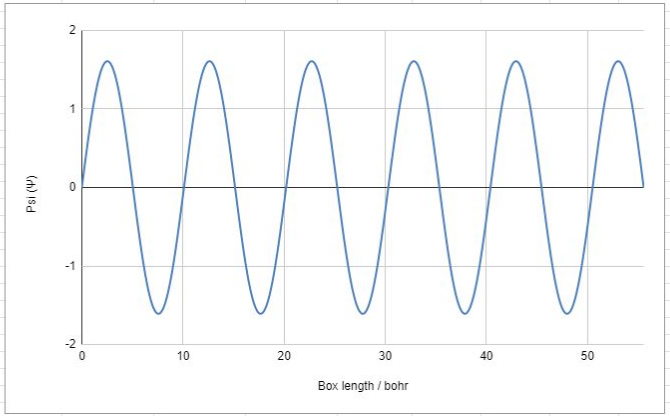
0

CALCULATION OF Ψ(x)

Paràmetres de derivada		
h	0,01	
Paràmetres de la molècula		**Unitats**
d(C=C)	1,4	Å
nre (C=C)	21	
a	55,56	bohr
Energia a optimitzar		**Unitats**
E	0,193432	Ha
Valor de Ψ(x) a optimitzar		**Cel·la del valor**
Ψ(a)	0,000059	B5571

Valors de Ψ(x)

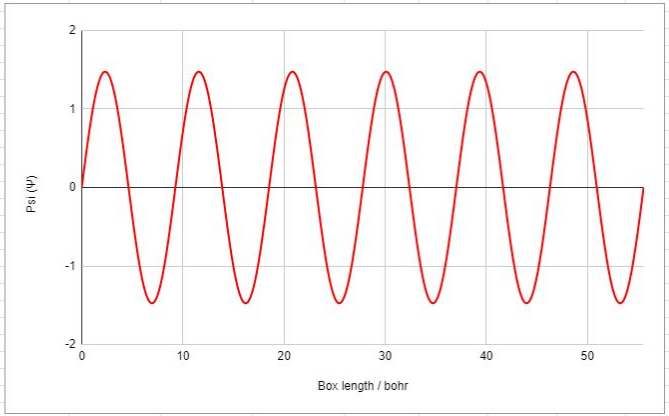
x	Ψ(x)
	-0,01
0	0
0,01	0,01
0,02	0,0199996131
0,03	0,0299984525
0,04	0,0399961314
0,05	0,0499922630
0,06	0,0599864606
0,07	0,0699783375
0,08	0,0799675072
0,09	0,0899535832
0,1	0,0999361792
0,11	0,1099149092
0,12	0,1198893869
0,13	0,1298592264
0,14	0,1398240422
0,15	0,1497834488
0,16	0,1597370607
0,17	0,169684493
0,18	0,1796253608
0,19	0,1895592795
0,2	0,1994858649
0,21	0,2094047328
0,22	0,2193154997
0,23	0,229217782
0,24	0,2391111968
0,25	0,2489953612



Paràmetres de derivada		
h	0,01	
Paràmetres de la molècula		**Unitats**
d(C=C)	1,4	Å
nre (C=C)	21	
a	55,56	bohr
Energia a optimitzar		**Unitats**
E	0,230200	Ha
Valor de Ψ(x) a optimitzar		**Cel·la del valor**
Ψ(a)	0,000050	N5571

Valors de Ψ(x)

x	Ψ(x)
	-0,01
0	0
0,01	0,01
0,02	0,0199995396
0,03	0,0299981584
0,04	0,0399953961
0,05	0,0499907924
0,06	0,0599838871
0,07	0,0699742202
0,08	0,0799613317
0,09	0,0899447617
0,1	0,0999240507
0,11	0,1098987393
0,12	0,119868368
0,13	0,129832478
0,14	0,1397906106
0,15	0,1497423071
0,16	0,1596871096
0,17	0,16962456
0,18	0,1795542009
0,19	0,1894755752
0,2	0,199388226
0,21	0,2092916969
0,22	0,2191855321
0,23	0,2290692759
0,24	0,2389424735
0,25	0,2488046701



CALCULATION OF Ψ(x)

Grey part

- **h**: step size of the numerical integration procedure
- **d(C=C)**: average distance between carbons (1.4 Å)
- **nre (C=C)**: number of carbon bonds of the molecule
- **a**: box lenght
  a = d(C=C)*nre(C=C)

Blue part

- **E**: energy of the particle inside the box
- **Ψ(a)**: last value of the Schrödinger's function

Paràmetres de derivada		
h	0,01	
Paràmetres de la molècula		**Unitats**
d(C=C)	1,4	Å
nre (C=C)	21	
a	55,56	bohr
Energia a optimitzar		**Unitats**
E	0,193432	Ha
Valor de Ψ(x) a optimitzar		**Cel·la del valor**
Ψ(a)	0,000059	B5571

CALCULATION OF Ψ(x)

Values of Ψ(x)

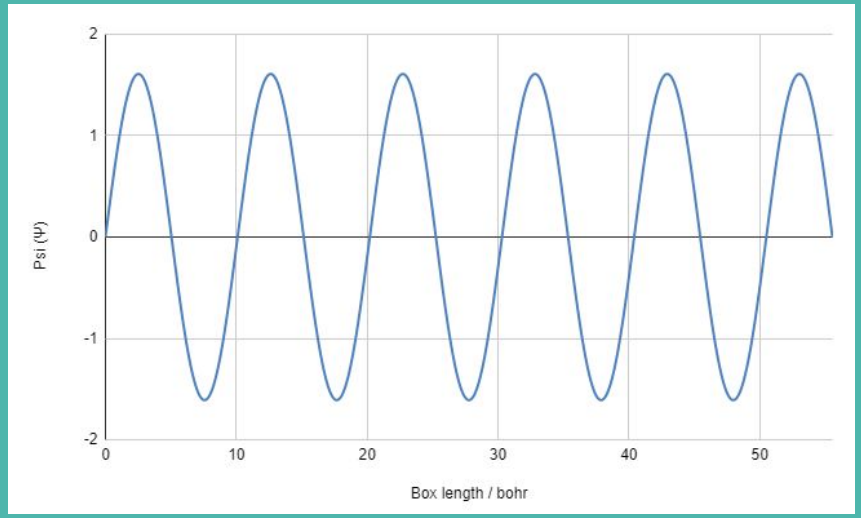
x: values from 0 to the lenght of the box

Valors de Ψ(x)	
x	Ψ(x)
	-0,01
0	0
0,01	0,01
0,02	0,0199996131
0,03	0,0299984525
0,04	0,0399961314
0,05	0,0499922630
0,06	0,0599864606
0,07	0,0699783375
0,08	0,0799675072
0,09	0,0899535832
0,1	0,0999361792
0,11	0,1099149092
0,12	0,1198893869
0,13	0,1298592264
0,14	0,1398240422
0,15	0,1497834488

Ψ(x): application of the formula

fx =2*B16*(1-B2^2*B8)-B15

Graphic



ANALYTICAL FORMULA

HOMO

$$E = \frac{n^2 \pi^2}{2a^2}$$

Comprovació del valor d'E		
n	11	
E_real	0,19343303495	Hartrees

LUMO

$$E = \frac{n^2 \pi^2}{2a^2}$$

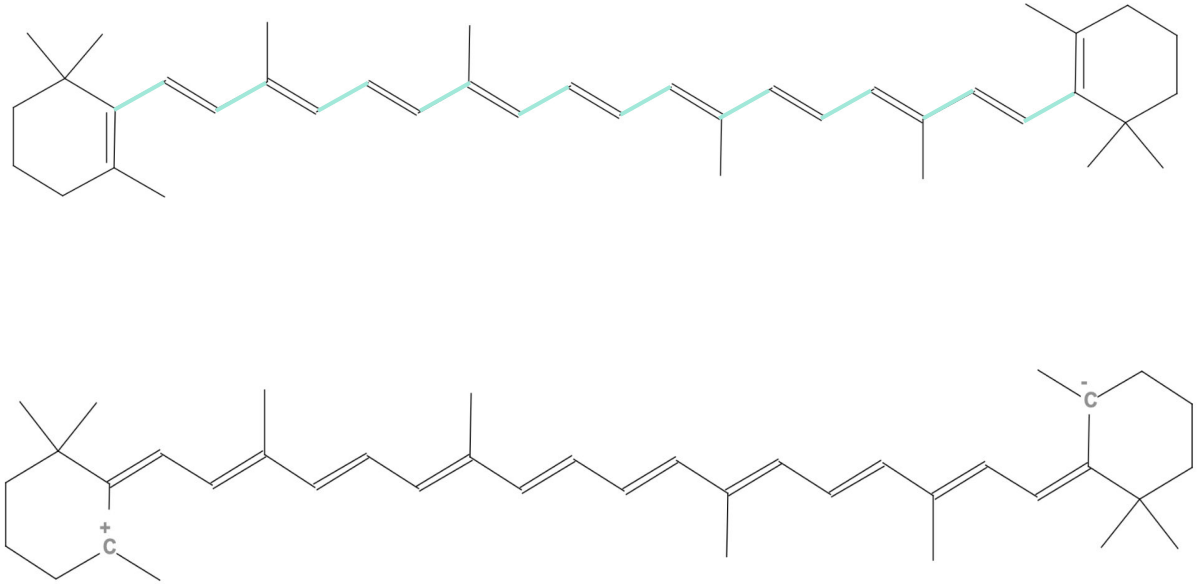
Comprovació del valor d'E		
n	12	
E_real	0,23020129779	Hartrees

$$\hbar = 1$$

$$m_e = 1$$

$$E = \frac{n^2 h^2}{8 m_e a^2} = \frac{n^2 (2\pi\hbar)^2}{8 m_e a^2} = \frac{n^2 4\pi^2}{8a^2} = \frac{n^2 \pi^2}{2a^2}$$

PARTICLE-IN-A-BOX MODEL APPLIED TO MOLECULES



CALCULATION OF ΔE

Orbital	n	E	
LUMO	12	0,230200	
HOMO	11	0,193432	
	Total	0,036768	Ha
		1,60299094E-19	J

Càlcul de λ de la llum absorbida amb l'aproximació			
E (J)	f (Hz)	λ (m)	Color observable **[λ (nm)]**
1,60299094E-19	2,41921818E+14	1,24007004E-06	1.240,0700

Orbital	n	E	
LUMO	12	0,23020129779	
HOMO	11	0,19343303495	
	Total	0,03676826284	Ha
		1,60300240E-19	J

Càlcul de λ de la llum absorbida amb l'aproximació			
E (J)	f (Hz)	λ (m)	Color observable **[λ (nm)]**
1,60300240E-19	2,41923548E+14	1,24006118E-06	1.240,0612

FROM ENERGY TO WAVELENGHT

- Obtain ΔE
  - ΔE = LUMO – HOMO

- From Hartree to Joules
  - 1 E_h = 4.359744722 × 10^{-18} J

Orbital	n	E	
LUMO	12	0,230200	
HOMO	11	0,193432	
	Total	0,036768	Ha
		1,60299094E-19	J

- From energy to frequency

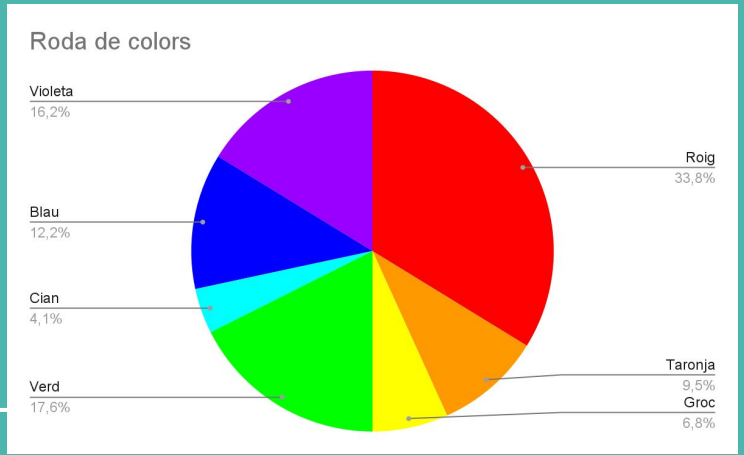
$$\frac{E}{h} = \nu$$

- From frequency to wavelenght

$$\frac{\nu}{c} = \lambda$$

EMISSION SPECTRA

Càlcul de λ de la llum absorbida amb l'aproximació			
E (J)	f (Hz)	λ (m)	Color observable [λ (nm)]
1,60299094E-19	2,41921818E+14	1,24007004E-06	1.240,0700



CONDITIONAL FORMATTING

ABSORPTION WAVELENGHT		EMISSION WAVELENGHT
if	then	
685-750 nm		green
670-685 nm		cian
625-670 nm		blue
590-625 nm		violet
565-590 nm		violet
560-565 nm		violet
500-560 nm		red
485-500 nm		red
440-485 nm		red
405-440 nm		orange
380-405 nm		yellow

RESULTS

RESULTS FOR BETA-CAROTENE

Orbital	n	E	
LUMO	12	0,230200	
HOMO	11	0,193432	
	Total	0,036768	Ha
		1,60299094E-19	J

Càlcul de λ de la llum absorbida amb l'aproximació			
E (J)	f (Hz)	λ (m)	Color observable [λ (nm)]
1,60299094E-19	2,41921818E+14	1,24007004E-06	1.240,0700

Orbital	n	E	
LUMO	12	0,23020129779	
HOMO	11	0,19343303495	
	Total	0,03676826284	Ha
		1,60300240E-19	J

Càlcul de λ de la llum absorbida amb l'aproximació			
E (J)	f (Hz)	λ (m)	Color observable [λ (nm)]
1,60300240E-19	2,41923548E+14	1,24006118E-06	1.240,0612

Absorption maxima: ~470 nm

Approximation: 1240 nm

RESULTS FOR BUTA-1,3-DIENE

Orbital	n	E	
LUMO	3	0,704480	
HOMO	2	0,313100	
	Total	0,391380	Ha
		1,70631689E-18	J

Càlcul de λ de la llum absorbida amb l'aproximació			
E (J)	f (Hz)	λ (m)	Color observable [λ (nm)]
1,70631689E-18	2,57515669E+15	1,16497765E-07	116,4978

Orbital	n	E	
LUMO	3	0,70448419514	
HOMO	2	0,31310408673	
	Total	0,39138010841	Ha
		1,70631736E-18	J

Càlcul de λ de la llum asorbida amb la fórmula analítica			
E (J)	f (Hz)	λ (m)	Color observable [λ (nm)]
1,70631736E-18	2,57515741E+15	1,16497733E-07	116,4977

Absorption maxima: 217 nm

Approximation: 116 nm

an error of less than 50%

CONCLUSION

THANK YOU!