



FHS/Cyberingeniørskolen  
Matematiske Metoder 2

12. okt. 2025

---

# PROSJEKTOPPGAVE 1

## Schrödingerligningen

ING2501-1 25H MATEMATISKE METODER 2

---

Klasse: VING 78

Gruppe: HOLM, HORNBERG, JOHANSEN, JONLI

# Sammendrag

I denne rapporten brukes schrödingerligningen for å beskrive kvantemekaniske systemer. Hensikten er å forstå hvordan ligningen kan brukes til å sammenligne de kvantemekaniske egenskapene til en partikkel i boks med uendelige og endelige potensialbarrierer.

Gjennom teori og matematisk utledning ble den tidsavhengige og tidsuavhengige schrödingerligningen etablert. Deretter ble ligningen anvendt på to systemer. Det ene systemet med uendelig potensialbarriere ble igjen splittet opp i deler. Ett som var basert på tidsuavhengige bølgefunksjoner, og et annet som var tidsavhengige bølgefunksjoner.

Den tidsuavhengige delen ble det vist at systemet kan beskrives med flere bølgefunksjoner og dets korresponderende energinivå. For den tidsavhengige delen ble det vist hvordan bølgefunksjonen utvikler seg over tid som en superposisjon av flere stasjonære tilstander.

For systemet med det endelige potensialbarrieren ble det vist at bølgefunksjonen ikke forsvinner fullstendig utenfor boksen. Dette innebærer at partikkelen har en viss sannsynlighet for å befinne seg utenfor potensialet, et fenomen kjent som kvantetunnelering. Fenomenet vises gjennom å utlede transmisjons- og refleksjonskoeffisientene, og analysere hvordan disse varierer med partikkelens energi og barrierens størrelse.

Resultatene bekrefter at schrödingerligningen gir en konsistent matematisk beskrivelse av partikkelens oppførsel på mikroskopisk nivå, og viser tydelig forskjellen mellom klassisk og kvantemekanisk fysikk. Prosjektet har gitt en dypere forståelse for hvordan kvantefenomener kan beskrives matematisk.

# Innhold

<b>1</b>	<b>Innledning</b>	<b>1</b>
1.1	Bakgrunn . . . . .	1
1.2	Om prosjektet . . . . .	1
1.3	Bruk av KI . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Teori</b>	<b>2</b>
2.1	Fourierrekker . . . . .	2
2.2	Bølgefunksjon . . . . .	2
2.3	Eulers formel . . . . .	3
2.4	Kvantefysikk vs klassisk fysikk . . . . .	4
2.4.1	Kinetisk energi . . . . .	4
2.4.2	Potensiell energi . . . . .	4
2.4.3	Kvantetunneling . . . . .	4
2.4.4	Superposisjon . . . . .	5
2.4.5	Heisenbergs usikkerhetsprinsipp . . . . .	5
2.4.6	Kvantiserte energinivåer . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Metode</b>	<b>6</b>
3.1	Utleddning av schrödingerligningen . . . . .	6
3.1.1	Bølgefunksjonen for en fri partikkel . . . . .	7
3.1.2	Utleddning av operator for bevegelsesmengde . . . . .	7
3.1.3	Utleddning av operator for energi . . . . .	7
3.1.4	Klassisk energi og kvantemekanisk oversettelse . . . . .	8
3.1.5	Innføring av operatorer . . . . .	8
3.1.6	Den tidsavhengige schrödingerligningen i 1D . . . . .	8
3.1.7	Den tidsuavhengige schrödingerligningen . . . . .	9
3.2	Partikkel i boks med uendelig potensialvegg . . . . .	10
3.2.1	Definer potensialenergien $V$ . . . . .	11
3.2.2	Løs schrödingerligningen . . . . .	11
3.2.3	Definer bølgefunksjonen . . . . .	12
3.2.4	Definer de tillatte energinivåene . . . . .	15
3.3	Spesifikk bølgefunksjon for den tidsavhengige schrödingerligningen . . . . .	16
3.4	Partikkel i boks med endelig barriere . . . . .	18
3.4.1	Modellering og potensialdefinisjon . . . . .	18
3.4.2	Løsning av schrödingerligningen og Betingelser . . . . .	18
<b>4</b>	<b>Resultater</b>	<b>28</b>
4.1	Partikkel i boks med uendelig potensiale . . . . .	28
4.1.1	Tidsuavhengig bølgefunksjon . . . . .	28
4.1.2	Tidsavhengig bølgefunksjon . . . . .	30
4.2	Partikkel i boks med endelig potensial . . . . .	32
<b>5</b>	<b>Diskusjon</b>	<b>33</b>
5.1	Den tidsuavhengige bølgefunksjonen . . . . .	33
5.2	Den tidsavhengige bølgefunksjonen . . . . .	34
5.2.1	Observasjon av gjentakende mønstre i bølgefunksjonen . . . . .	35
5.3	Transmisjons- og refleksjonskoeffisienten . . . . .	36

6	Konklusjon	37
7	Litteraturreferanser	38
8	Vedlegg	39

# 1 Innledning

## 1.1 Bakgrunn

Schrödingerligningen bygger videre på flere sentrale ideer som kom på begynnelsen av 1900-tallet. Einstein publiserte sin relativitetsteori, som brøt med det klassiske synet på rom og tid og etablerte en sammenheng mellom energi, masse og bevegelsesmengde. I lavhastighetsgrensen kan dette tilnærmes til

$$E \approx mc^2 + \frac{p^2}{2m},$$

der det siste leddet tilsvarer klassisk kinetisk energi. Selv om schrödingers ligning ikke er relativistisk, bygget den på denne innsikten: energi og momentum henger uløselig sammen.

Det neste steget i fysikkens gjennombrudd kom fra Louis de Broglie i 1924. Han foreslo at partikler, som elektroner, også kunne beskrives som bølger. For å vise dette satte han opp to enkle ligninger. Den første sier at bølgelengden til en partikkel bestemmes av hvor stor bevegelsesmengde den har:

$$\lambda = \frac{h}{p}.$$

Den andre ligningen kobler energien til partikkelen sammen med frekvensen:

$$f = \frac{E}{h}.$$

Disse ideene bygger direkte på Einsteins energi-momentum-relasjon, som viste hvordan energi og bevegelsesmengde henger sammen i relativitetsteorien. De Broglie tok dette videre ved å tildele materiepartikler bølgeegenskaper. Det er disse ideene som til slutt førte til schrödingerligningen. Einsteins bidrag var å gi den matematiske koblingen mellom energi og momentum, mens de Broglies bidrag var å oversette dette til konkrete bølgelengder og frekvenser. Dette ble det direkte utgangspunktet for Schrödinger, som utviklet en bølgeligning som kunne samle disse prinsippene i én matematisk beskrivelse av hvordan partikkelbølger oppfører seg.

## 1.2 Om prosjektet

Schrödingerligningen åpnet en helt ny verden innenfor matematikk og fysikk. Den representerer et fundamentalt skifte i måten vi beskriver naturen på, fra deterministiske lover til sannsynlige bølgefenomener.

Gjennom dette prosjektet ønsket vi å utforske hvordan schrödingerligningen kan brukes i praksis for å beskrive enkle kvantemekaniske systemer. Det finnes mange retninger man kan gå i, men vi valgte å fokusere på et klassisk og samtidig svært illustrativt eksempel: partikkel i en boks.

Prosjektets problemstilling er derfor:

**Hvordan kan schrödingerligningen brukes til å beskrive og sammenligne de kvantemekaniske egenskapene til en partikkel i en boks med uendelige og endelige potensialbarrierer?**

Vi har derfor delt opp eksempelet i flere deler. De to hoveddelene er, som forklart i problemstillingen, den uendelige potensialbrønnen og den endelige potensialbrønnen. Videre har vi undersøkt begge tilfellene ved å bruke både den tidsuavhengige og den tidsavhengige schrödingerligningen, for å se hvilke forskjeller dette medfører i løsningene. Ved hjelp av Python har vi visualisert resultatene og sammenlignet hvordan endringer i potensialet påvirker både energinivåene og bølgefunksjonene i systemet.

## 1.3 Bruk av KI

I denne rapporten har vi brukt KI som hjelpemiddel. Det har primært vært brukt til rettskriving og formulering av setninger. I tillegg har det også blitt brukt til å finne relevante kilder til informasjon. Videre har KI blitt brukt som støtte i idéutvikling og strukturering av innhold, for eksempel ved å foreslå måter å organisere avsnitt eller fremheve sentrale poenger. All bruk av KI har vært kritisk vurdert, og alt innhold er bearbeidet og kvalitetssikret for å sikre at all informasjon er korrekt.

# 2 Teori

## 2.1 Fourierrekker

Fourierrekker er matematiske rekker som inneholder sinus- og cosinusfunksjoner. Navnet kommer fra Joseph Fourier, hvor han brukte rekkene som grunnlag for beregninger av varmeledning. En fourierrekke kan skrives på formen

$$A_0 + A_1 \cos x + A_2 \cos 2x + \dots + B_1 \sin x + B_2 \sin 2x + \dots$$

eller

$$A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (A_n \cos(nx) + B_n \sin(nx))$$

Fourierrekker brukes til å representere periodiske funksjoner ved hjelp av enkle bølgeformer. Dette gjør det mulig å analysere hvordan et signal eller en funksjon består av ulike frekvenser. Koeffisientene  $A_n$  og  $B_n$  bestemmer hvor mye hver cosinus- og sinuskomponent bidrar. Ved å summere mange slike ledd kan man tilnærme lik enhver periodisk funksjon, uavhengig av hvor komplisert formen er.

## 2.2 Bølgefunksjon

En bølgefunksjon  $\Psi$  er et grunnleggende begrep i kvantemekanikken. Den beskriver tilstanden til et kvantesystem, for eksempel et atom eller et elektron, og inneholder all informasjon som er mulig å oppnå om systemet. Bølgefunksjonen i seg selv er ikke unikt for kvantemekanikk, da den brukes til for eksempel vannbølger, lydbølger og elektromagnetiske bølger. Derimot er det verdt å merke at bølgefunksjonen innenfor kvantemekanikk

ikke kan måles direkte, fordi den ikke har noe fysisk medium. Likevel kan vi visualisere den gjennom den matematiske formelen. Bølgefunksjonen kan generelt skrives ved hjelp av en amplitude  $\psi_0$  og en fase  $\theta$  gjennom relasjonen

$$\Psi = \psi_0 e^{i\theta}$$

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}$$

hvor  $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$  (Eulers formel).

For å kunne trekke ut fysiske målbare størrelser fra bølgefunksjonen, benyttes dens modulus. Modulusen til  $\Psi$  defineres som

$$|\Psi| = \sqrt{\Psi^* \Psi},$$

hvor  $\Psi^*$  er det komplekse konjugatet. Når man kvadrerer modulusen, får man:

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi,$$

Dette representerer sannsynlighetstettheten for å finne partikkelen i et gitt område i rom og tid. Dette er kjent som Borns regel, fra fysikeren Max Born, og utgjør koblingen mellom den matematiske formen og de fysiske observasjonene i kvantemekanikken. [1] [2] [3]

## 2.3 Eulers formel

Eulers formel sier at  $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ . Den knytter sammen de tre viktigste matematiske funksjonene i analyse, altså da eksponential, sinus og cosinus. Den gjør at vi kan beskrive svinginger og bølger med komplekse eksponentialer i stedet for å jobbe med sinus og cosinus hver for seg, noe som gjør det mye enklere. Dermed med hjelp av Eulers formel så kan vi regne med eksponentialformen, så kan vi bruke formelen til å hente ut de reelle sinus- og cosinusdelene når vi trenger dem. For å si det enkelt, så er Eulers formel verktøyet som gjør det mulig å uttrykke kvantetilstander på en enkel måte, og den er avgjørende for å løse og tolke Schrödingerligningen.

Når vi løser schrödingerligningen for en fri partikkel eller en partikkel i en boks, dukker det ofte opp løsninger på formen  $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ , der  $k$  er et tall som henger sammen med partikkelens energi. Da kan vi bruke Eulers formel:

$$e^{ikx} = \cos(kx) + i \sin(kx), \quad e^{-ikx} = \cos(kx) - i \sin(kx)$$

Setter vi dette inn så får vi:

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

Deretter samler vi leddene, da kan vi skrive løsningen som en kombinasjon av sinus og cosinus:

$$\psi(x) = C \cos(kx) + D \sin(kx),$$

der C og D er nye konstanter, de er kombinasjonene av A og B. [4]

## 2.4 Kvantefysikk vs klassisk fysikk

### 2.4.1 Kinetisk energi

Kinetisk energi er energien som en gjenstand har på grunn av sin hastighet. I klassisk mekanikk er kinetisk energi direkte avhengig av objektets masse og hastighet, altså bevegelsesmengde, der en økning av disse egenskapene gir høyere kinetisk energi:

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2$$

I kvantefysikken opptrer kinetisk energi også hos partikler som elektroner og protoner, men her beskrives partiklene både som partikler og bølger. Dette gjør at kinetisk energi kan uttrykkes slik:

$$E_k = \frac{p^2}{2m}, \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

Samlet sett representerer kinetisk energi et grunnleggende uttrykk for bevegelsesenergi som både gjelder for klassisk- og kvantefysikk, med tilpassninger i beskrivelse som er avhengig om det er på makroskopisk eller mikroskopisk nivå.

### 2.4.2 Potensiell energi

Potensiell energi er en form for lagret energi. Den opptrer når det virker krefter mellom to eller flere legemer. For eksempel er den potensielle energien til en ball større når den befinner seg høyt over bakken enn når den ligger på bakken. Dette er på grunn av at tyngdekraften vil gi ballen bevegelsesenergi eller kinetisk energi når den beveger seg nedover. Potensiell energi kommer i ulike former i fysikkens verden. For eksempel elektrisk potensiell energi, der et objekt har denne energien grunnet dets elektriske ladning når den befinner seg i et elektrisk felt. Elastisk potensiell energi kan legemer lagre potensiell energi ved å deformere legemet så det ikke lenger er i sin likevektstilstand. Et praktisk eksempel på dette er når man spenner en bue. Potensiell energi finnes også i former som gravitasjonell-, magnetisk-, kjemisk- og nukleære potensiell energi. Navnet potensiell energi viser til at energien er lagret og kan omdannes til andre former når den frigjøres.

### 2.4.3 Kvantetunnelering

Se for deg at du står og kaster en ball mot en vegg. Hver gang du kaster ballen, reflekteres den og kommer tilbake. Den eneste måten å få ballen over på den andre siden, er dersom ballens energi er større enn høyden på veggen.



I kvantefysikken fungerer det ikke helt slik. Hvis partikkelens energi er lavere enn barrierens høyde vil den fortsatt reflekteres tilbake stort sett, men finnes fortsatt en sannsynlighet for at partikkelen kan passere gjennom barrieren. Ifølge den klassiske fysikken burde ikke dette vært mulig. Dette fenomenet kalles *kvantetunnelering*.

Kvantetunnelering beskriver altså muligheten for at en partikkel «tunnelerer» gjennom en energibarriere som den klassisk sett ikke burde kunne passere. Når vi analyserer dette matematisk, snakker vi gjerne om to størrelser:

- **Transmisjonskoeffisienten (T)** – sannsynligheten for at partikkelen passerer gjennom barrieren.
- **Refleksjonskoeffisienten (R)** – sannsynligheten for at partikkelen reflekteres tilbake.

Disse to henger sammen gjennom energibevaring og sannsynlighetsfordeling:

$$T + R = 1$$

[5]

#### 2.4.4 Superposisjon

Et grunnleggende trekk ved kvantemekanikk er superposisjon. Dette er et av prinsippene som skiller kvantefysikken fra klassisk fysikk. I klassisk fysikk er resultater av eksperimenter og simuleringer deterministiske, mens kvantesystemer i stedet beskrives ved sannsynligheter. Superposisjon innebærer at en partikkel kan eksistere i en kombinasjon av flere mulige tilstander samtidig, helt til en måling foretas. Når vi observerer, “klapper” systemet sammen til én bestemt tilstand.

Fordi schrödingerligningen er lineær, kan flere løsninger kombineres. For partikkel i boks betyr dette at tilstanden ikke alltid er en enkelt egenfunksjon  $\psi_n$ , men en kombinasjon av flere:

$$\Psi(x, t) = c_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar} + \dots$$

Da får vi ikke en stasjonær bølge, men en tidsavhengig sannsynlighetsfordeling. Dette gir opphav til interferensmønstre, der sannsynligheten for å finne partikkelen på ulike steder i boksen varierer med tiden. Superposisjon viser altså at partikkelen kan være i en kombinasjon av energinivåer, helt til en måling tvinger systemet til å anta ett bestemt energinivå.

#### 2.4.5 Heisenbergs usikkerhetsprinsipp

Heisenberg usikkerhetsprinsipp sier at det finnes en grense for hvor nøyaktig vi samtidig kan kjenne både posisjonen og bevegelsesmengden til en partikkel. Matematisk uttrykkes dette som

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2},$$

der  $\Delta x$  er usikkerheten i posisjon og  $\Delta p$  er usikkerheten i momentum.

Dette prinsippet er svært relevant i kvantefysikkens verden og er sentral for vår forståelse

av hvordan kvanteverdenen fungerer. For modellen som fremlegges med partikkel i en boks vil dette prinsippet være sentralt for vår forståelse av hvordan partikkelen oppfører seg. Når partikkelen er innesluttet i et avgrenset område, vet vi med sikkerhet at den befinner seg innenfor boksen. Dette vil si at  $\Delta x$  er liten. Som følge av usikkerhetsprinsippet innebærer dette at usikkerheten i bevegelsesmengden  $\Delta p$  blir stor. Dermed kan partikkelen ikke være helt i ro, men må alltid ha en viss bevegelse for å skulle følge Heisenbergs prinsipp. Dette leder til konseptet nullpunktsenergi, som er den laveste energien et kvantesystem kan ha. I klassisk fysikk kunne man tenke seg at en partikkel i en boks kunne hatt null energi, men i kvantefysikken blir dette umulig. I stedet blir den laveste tillatte energien i en boks gitt ved

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}.$$

Nullpunktsenergien viser at selv i grunntilstanden har partikkelen en form for energi. Dette er en direkte konsekvens av usikkerhetsprinsippet.

#### 2.4.6 Kvantiserte energinivåer

Kvantiserte energinivåer uttrykker matematisk hvordan et fysisk system er beskrevet i kvantefysikken. I motsetning til klassiske tilstander, der posisjon og hastighet er definerte, beskrives et kvantesystem på en sannsynlighetsbasert måte. Dette innebærer at målinger kan gi ulike utfall med bestemte sannsynligheter. En partikkel kan derfor bare finnes i bestemte energinivåer. Dette er det som forklarer hvorfor elektroner i atomer er arrangert i skall med ulike energier.

Rent matematisk kan en kvantetilstand beskrives som en vektor i et komplekst vektorrom. I mer konkrete tilfeller benyttes bølgefunksjoner, som beskriver systemet som en kvantemekanisk bølge og gjør det mulig å beregne sannsynligheten for å finne partikkelen i et bestemt område.

Et sentralt eksempel er hydrogenatomet, der elektronets kvantetilstander er løsninger av schrödingerligningen:

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \phi),$$

hvor de tre kvantetallene  $n$ ,  $l$  og  $m$  bestemmer energinivåene og formen på orbitalene. Disse kvantetilstandene forklarer de karakteristiske energinivåene i hydrogen og ligger til grunn for atomets spektrallinjer. [6]

## 3 Metode

### 3.1 Utledning av schrödingerligningen

Utledningen av schrödingerligningen tar utgangspunkt i at partikler kan beskrives som bølger. Dette bygger på de Broglies hypotese som sier at enhver partikkel med bevegelsesmengde  $p$  og energi  $E$  også har bølgeegenskaper beskrevet ved

$$p = \hbar k \quad \text{og} \quad E = \hbar \omega$$

der  $k$  er bølgetallet og  $\omega$  er vinkelhastigheten. [7]

### 3.1.1 Bølgefunksjonen for en fri partikkel

Vi starter med den komplekse planbølgen som beskriver en fri partikkel:

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

Denne bølgefunksjonen varierer både i rom og tid, og den representerer sannsynlighetsamplituden for å finne partikkel i et gitt punkt  $x$  til et gitt tidspunkt  $t$ .

### 3.1.2 Utledning av operator for bevegelsesmengde

For å finne en matematisk beskrivelse av bevegelsesmengde i kvantemekanikk deriverer vi bølgefunksjonen med hensyn på posisjonen  $x$ :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \psi}{\partial x} &= A \frac{\partial e^{i(kx - \omega t)}}{\partial x} \\ &= Ae^{i(kx - \omega t)} \frac{\partial(i kx - i \omega t)}{\partial x} \\ &= \psi \cdot ik \\ &= ik\psi\end{aligned}$$

Denne derivasjonen gir oss tilbake bølgefunksjonen multiplisert med  $ik$ . I følge de Broglie er  $k$  direkte relatert til bevegelsesmengden ved  $p = \hbar k$ . Vi kan derfor skrive:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = i \frac{p}{\hbar} \psi$$

Dette gir oss en sammenheng mellom bevegelsesmengden  $p$  og romderivasjon, som vi kan omskrive til:

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Vi definerer derfor bevegelsesmengde-operatoren som:

$$\boxed{\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}}$$

### 3.1.3 Utledning av operator for energi

På tilsvarende måte kan vi finne energi-operatoren ved å derivere bølgefunksjonen med hensyn på tid:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \psi}{\partial t} &= A \frac{\partial e^{i(kx - \omega t)}}{\partial t} \\ &= Ae^{i(kx - \omega t)} \frac{\partial(i kx - i \omega t)}{\partial t} \\ &= \psi \cdot -i\omega \\ &= -i\omega\psi\end{aligned}$$

Denne gangen bruker vi sammenhengen  $E = \hbar\omega$  og får da:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \psi$$

Dette gir oss at:

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Vi definerer så energi-operatoren vår som:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

### 3.1.4 Klassisk energi og kvantemekanisk oversettelse

Schrödingerligningen bygger på prinsippet om energibevaring. I klassisk mekanikk beskrives den totale energien som summen av kinetisk og potensiell energi:

$$E = K + V$$

Den klassiske kinetiske energien er gitt som:

$$K = \frac{1}{2}mv^2$$

For å gjøre uttrykket anvendbart i kvantemekanikk, skriver vi det om i form av bevegelsesmengde ved å bruke  $p = mv$ . Dette gir:

$$K = \frac{p^2}{2m}$$

Setter vi dette inn i uttrykket for total energi får vi:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

### 3.1.5 Innføring av operatorer

I kvantemekanikk representeres fysiske størrelser som operatorer. vi kan derfor erstatte  $E$  og  $p$  med deres operatorformer:

$$\hat{E} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V$$

Vi setter inn uttrykkene våre for  $\hat{E}$  og  $\hat{p}$  og får:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})^2}{2m} + V \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \end{aligned}$$

### 3.1.6 Den tidsavhengige schrödingerligningen i 1D

Til slutt lar vi operatorene våre virke på bølgefunksjonen  $\psi(x, t)$ :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t)$$

Dette er den tidsavhengige schrödingerligningen i én dimensjon. Den venstre siden beskriver hvordan bølgefunksjonen endrer seg i tid, mens høyre side beskriver endringen i rom og effekten av potensialet.

### 3.1.7 Den tidsuavhengige schrödingerligningen

For å utlede den tidsuavhengige schrödingerligningen kan vi ta utgangspunkt i den tidsavhengige ligningen. For å komme frem til den tidsuavhengige ligningen antar vi at potensialet  $V$  ikke varierer med tiden. Fordi  $V$  ikke avhenger av tiden kan vi anta at løsningen kan skrives som et produkt av en romlig del og tidsdelen. Dette gir oss:

$$\psi(x, t) = \phi(x)T(t)$$

Her definerer vi  $\phi$  som den romlige delen, og  $T$  som tids delen. Hvis vi setter inn i dette i den tidsavhengige schrödingerligningen får vi:

$$\begin{aligned} i\hbar\phi(x)\frac{dT(t)}{dt} &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) \right] T(t) \\ i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\phi(x)}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x) \end{aligned}$$

Venstresiden i denne ligningen avhenger kun av  $t$ , mens høyresiden avhenger kun av  $x$ . For at ligningen skal stemme for alle  $x$  og  $t$  må begge sider være lik en konstant verdi. Denne konstanten tolkes til å være systemets energi  $E$ . Dermed kan vi sette begge sider lik  $E$ :

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt} &= E \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\phi(x)}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x) &= E \end{aligned}$$

Tids delen:

$$i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt} = E$$

kan skrives om til

$$\frac{dT(t)}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}T(t)$$

Dette er en første ordens ordinær differensial ligning som har den generelle løsningen på formen:

$$T(t) = Ce^{at}$$

Ved å sammenlikne uttrykkene våre får vi at  $a = -\frac{iE}{\hbar}$ . Dette gir oss:

$$T(t) = Ce^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

Den komplekse  $C$  kan inkluderes i  $\phi(x)$  fordi vi kan skalere bølgefunksjonen. vi skriver derfor:

$$T(t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

Den fulle bølgefunksjonen blir nå:

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

Når vi regner sannsynlighetstettheten for å finne partikkelen i punktet  $x$  ved tiden  $t$  regner vi:

$$|\psi(x, t)|^2 = \psi^*\psi$$

$\psi^*$  er det komplekse konjugatet til  $\psi$  og er lik  $\psi^* = \phi(x)e^{\frac{iE}{\hbar}t}$ . Dette gir oss:

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= \psi^*(x, t)\psi(x, t) \\ &= [\phi^*(x)e^{\frac{iE}{\hbar}t}][\phi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}] \\ &= \phi^*(x)\phi(x)e^{\frac{iE}{\hbar}t - \frac{iE}{\hbar}t} \\ &= \phi^*(x)\phi(x) \\ &= |\phi(x)|^2 \end{aligned}$$

Fordi tids uttrykket utgår kan vi si at sannsynlighetsfordelingen er tidsuavhengig. hvis vi så tar ligningen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi(x)} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x) = E$$

og multipliserer med  $\phi(x)$  får vi:

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

som er den tidsuavhengige schrödingerligningen. [8]

### 3.2 Partikkel i boks med uendelig potensialvegger

Partikkel i boks modellen oppstod i de tidlige årene av kvantemekanikken på 1920-tallet, da Schrödinger, Heisenberg og Born utviklet de første matematiske beskrivelsene av kvantesystemer. Erwin Schrödinger formulerte i 1926 sin berømte ligning, og forskere trengte enkle systemer der ligningen kunne løses nøyaktig for å teste de nye prinsippene. [9]

Dermed oppstod den uendelige potensialbrønnen, senere kjent som ”partikkel i boks”. Den er et av de første eksemplene brukt til å illustrere hvordan schrödingerligningen gir kvantiserte energinivåer. Eksperimentet i seg selv beskriver en partikkel som beveger seg innenfor en uendelig dyp brønn som partikkelen ikke kan komme seg ut fra. Løsningen til problemet gir de mulige verdiene til bølgefunksjonen  $\psi$  og dets korresponderende kvantiserte energinivåer  $E$ .  $E$  står for de tillatte energiverdiene partikkelen kan ha i systemet. Disse er kvantiserte, altså diskrete nivåer bestemt av schrödingerligningen.

For å løse partikkel-i-boks-problemet i 2 dimensjoner, kan man dele det opp i overordnede steg:

- Definer potensialenergien  $V$
- Løs schrödingerligningen
- Definer bølgefunksjonen
- Definer de tillatte energinivåene

### 3.2.1 Definer potensialenergien $V$

For å kunne gjennomføre partikkel-i-boks-problemet må vi definere den uendelige potensialbrønnen. Vi antar at potensialenergien overalt utenom boksen tilsvarer uendelig:

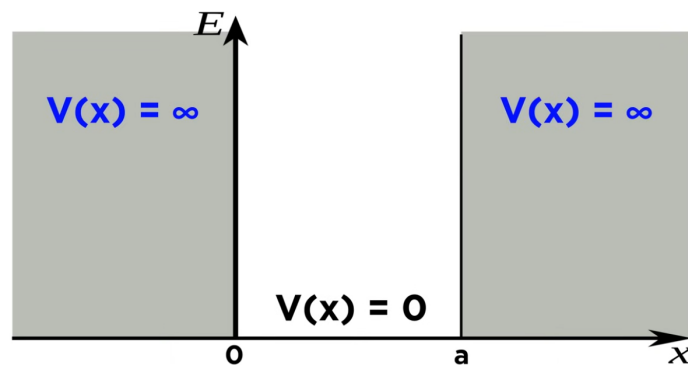
$$V(x) = \infty.$$

Boksen i seg selv antar vi har en potensialenergi på null:

$$V(x) = 0,$$

og har en gitt lengde mellom 0 og en variabel  $a$ . Intervallet for potensialenergien vil da bli beskrevet slik:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x \leq 0 \text{ eller } x \geq a. \end{cases}$$



Figur 1: Energipotensialet partikkel i boks

For å forstå hensikten med å definere disse potensialenergiene, må vi først se nærmere på hvordan potensiell energi fungerer. Som tidligere nevnt er potensiell energi en form for lagret energi. Et objekt med høy potensiell energi har en naturlig tendens til å bevege seg mot områder med lavere potensiell energi. For eksempel vil en ball falle nedover fordi den mister gravitasjonell potensiell energi. Når vi i dette tilfellet sier at potensialenergien utenfor boksen er  $\infty$ , uttrykker vi matematisk at partikkelen umulig kan oppholde seg i disse områdene.

### 3.2.2 Løs schrödingerligningen

Etter at energipotensialet og boksens grenser er bestemt, kan vi nå se nærmere på hvor partikkelen kan finnes, og hvordan den oppfører seg inne i boksen. Ettersom partikkelener et kvantepartikkel må vi bruke schrödingerligningen for å beskrive systemet. Dette gjøres ved å finne ut hvilke bølgefunksjoner  $\psi(x)$  som tilfredstiller schrödingerligningen. Dette tilsvarer å finne de tillatte tilstandene som et partikkel kan ha i boksen, samt hva sannsynlighetstettheten  $|\psi|^2$  ser ut og dets tillatte energier. Alt dette kan løses gjennom å bestemme hvilke bølgefunksjoner som tilfredsstiller grensebetingelsene som er pålagt av potensialet, og parametrene som er pålagt av schrödingerligningen.

Som tidligere nevnt da vi definerte potensialenergien  $V$ , vil potensialenergien utenfor boksen være uendelig som matematisk beskriver at partikkelen ikke kan være der. Det innebærer at for disse områdene vil sannsynlighetstetthetsfunksjonen  $|\psi|^2$  være lik null.

$$p(x) = |\psi(x)|^2 = \psi^*(x) \psi(x) = 0$$

Når vi ser på potensialet inni selve boksen ser vi at  $V(x) = 0$ , dette gjør at sannsynlighetstetthetsfunksjonen vil ikke i dette tilfellet være null, som tilsier at bølgefunksjonen kan heller ikke være lik null. Da ender vi opp med følgende betingelse for bølgefunksjonen:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= 0, & x &\leq 0 \text{ eller } x \geq a, \\ \psi(x) &\neq 0, & 0 &< x < a. \end{aligned}$$

Ettersom bølgefunksjonen i boksen ikke er lik null, kan vi finne verdien ved å bruke den tidsuavhengige schrödingerligningen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi$$

Videre brukes noen matematiske triks for å simplificere ligningen.

$$\begin{aligned} -\frac{2m}{\hbar^2} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) &= -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi \end{aligned}$$

Deretter kan vi simplificere mer ved å sette:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 \psi, \quad \text{der } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Når vi da flytter over  $k^2 \psi$  har vi klart å simplificert schrödingerligningen og endt opp med en andregrads differensialligning:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0$$

### 3.2.3 Definer bølgefunksjonen

For å finne den generelle løsningen på andregrads differensialligningen, regner vi ut differensialligningen: Vi antar en løsning av formen

$$\psi(x) = e^{rx},$$



der  $r$  er en konstant. Setter vi dette inn i diff.ligningen får vi:

$$\frac{d^2}{dx^2}(e^{rx}) + k^2 e^{rx} = 0$$

$$r^2 e^{rx} + k^2 e^{rx} = 0$$

$$r^2 + k^2 = 0$$

$$r^2 = -k^2 \quad \Rightarrow \quad r = \pm ik$$

Når røttene er komplekse  $r = \pm ik$ , er den generelle løsningen:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Ved Eulers formel  $e^{ix} = \cos x + i \sin x$ , kan vi skrive dette som:

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

Videre ser vi på randbetingelsene  $\psi(0) = \psi(a) = 0$ , ettersom bølgefunksjonen må være kontinuerlig fra  $0 < x < a$ . Vi sjekker først for  $\psi(0) = 0$ :

$$\psi(0) = Ae^{ik \cdot 0} + Be^{-ik \cdot 0}$$

$$\psi(0) = A + B$$

$$B = -A$$

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Ae^{-ikx}$$

$$\psi(x) = A \sin(kx)$$

Deretter sjekker vi for  $\psi(a) = 0$ :

$$\psi(a) = A \sin(ka) = 0$$

$$\sin(ka) = 0$$

$$ka = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$k = \frac{n\pi}{a}$$

Når vi anvender randbetingelsene på den generelle løsningen finner vi at bølgefunksjonen får formen

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Her representerer  $n$  et heltall som bestemmer hvilke løsninger som er tillatt. Imidlertid ser vi at for  $n = 0$  blir bølgefunksjonen

$$\psi_0(x) = A_0 \sin(0 \cdot x) = 0,$$

Som gir løsningen  $\psi(x) = 0$ , noe som ikke gir fysisk mening ettersom at sannsynligheten for å finne partikkelen da blir null. Dermed kastes vekk  $n = 0$  og den nye løsningen er dermed gitt ved

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Alle disse funksjonene representerer de stasjonære tilstandene til en partikkel i en uendelig potensialbrønn. Det siste som nå må gjøres for å få enn fullstendig eksplisitt løsning på bølgefunksjonen er å normalisere løsningene slik at sannsynligheten for å finne partikkelen innenfor intervallet  $0 < x < a$  blir lik én. Normaliseringsprosessen gjør at vi kan bestemme konstanten  $A_n$ , noe som løses slik:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = \int_0^a |\psi_n(x)|^2 dx = 1$$

Siden vi normaliserer må integralet være lik 1. Dette er fordi den totale sannsynligheten for å finne partikkelen et sted i det tilgjengelige området. Hvis vi integrerer over hele intervallet der partikkelen kan eksistere, må summen av alle små sannsynligheter bli 100%, altså 1.

Vi setter inn bølgefunksjonen i integralet og løser for  $A_n$ :

$$\int_0^a |A_n \sin(n\pi x/a)|^2 dx = 1$$

$$|A_n|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = 1$$

$$|A_n|^2 \int_0^a \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2} dx = 1$$

$$|A_n|^2 \frac{1}{2} \int_0^a [1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)] dx = 1$$

$$|A_n|^2 \frac{1}{2} \left[ \int_0^a 1 dx - \int_0^a \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) dx \right] = 1$$

$$|A_n|^2 \frac{1}{2} [a - 0] = 1$$

$$|A_n|^2 \frac{a}{2} = 1$$

$$|A_n|^2 = \frac{2}{a}$$

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Nå som vi har løst for  $A_n$  kan vi uttrykke løsningen som et sett av bølgefunksjoner, som er egenfunksjonene som tilfredstiller schrödingerligningen for randbetingelsene i boksen.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Her ser vi at for hvert heltall som n er, tilsvarer en egen bølgefunksjon

$$n = 1 \Rightarrow \psi_1$$

$$n = 2 \Rightarrow \psi_2$$

$$n = 3 \Rightarrow \psi_3$$

### 3.2.4 Definer de tillatte energinivåene

Hver bølgefunksjon har sin korresponderende egenenergi, noe vi kan løse for ettersom vi har definert den generelle løsningen for bølgefunksjonen. Hvis vi beveger oss tilbake til uttrykket vi satt som k, kan vi modifisere uttrykket for å finne  $E_n$

$$k^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$$

Deretter setter vi inn for  $k = \frac{n\pi}{a}$  som gjør at uttrykket blir slik:

$$\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

### 3.3 Spesifikk bølgefunksjon for den tidsavhengige schrödingerligningen

Som utledet tidligere fikk vi den generelle løsningen for den tidsavhengige schrödingerligningen:

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-iEt/\hbar}.$$

Denne løsningen gjelder kun for én bestemt energitilstand. I praksis kjenner vi sjelden nøyaktig hvilken energi partikkelen har. Det vi derimot ofte kjenner, er bølgefunksjonens form ved starttidspunktet  $t = 0$ . En slik funksjon kan vanligvis ikke beskrives ved én enkelt stasjonær løsning, men må uttrykkes som en kombinasjon av flere.

Schrödingerligningen er lineær, noe som gjør at vi kan beskrive den ved superposisjon. Dette gir oss den generelle løsningen som en sum av alle stasjonære tilstander:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Her er  $\phi_n(x)$  egenfunksjonene og  $E_n$  tilhørende energier. Koeffisientene  $c_n$  bestemmer hvor mye hver energikomponent bidrar. For å kunne løse for  $c_n$  trenger vi en ny grensebetingelse. Dette gjøres ved å definere hvordan bølgefunksjonen ser ut ved en spesifikk tid, for eksempel  $t = 0$ .

Som startbetingelse for den tidsavhengige schrödingerligningen velger vi en lineær funksjon som avtar jevnt fra venstre mot høyre i boksen:

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A(a - x), & 0 < x < a, \\ 0, & x \leq 0 \text{ eller } x \geq a. \end{cases}$$

Vi vet at den totale sannsynligheten skal være 1, og kan derfor sette betingelsen for å løse for  $A$ :

$$\int_0^a |\Psi(x, 0)|^2 dx = 1.$$

Ved å sette inn uttrykket for  $\Psi(x, 0)$  får vi:

$$A^2 \int_0^a (a - x)^2 dx = 1.$$

Integralet løses til:

$$A^2 \left[ a^3 - a^3 + \frac{a^3}{3} \right] = A^2 \frac{a^3}{3} = 1,$$

som gir normaliseringskonstanten:

$$A = \sqrt{\frac{3}{a^3}}.$$

Vi kan nå begynne å løse for  $c_n$ . Integralet vi får er:

$$c_n = \int_0^a \phi_n(x) \Psi(x, 0) dx = \sqrt{\frac{2}{a}} A \int_0^a (a - x) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx.$$

Integralet løses ved delvis integrasjon:

$$\int_0^a (a - x) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \left[ (a - x) \left( -\frac{a}{n\pi} \cos\frac{n\pi x}{a} \right) \right]_0^a - \frac{a}{n\pi} \int_0^a \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx.$$

Grenseleddene gir:

$$0 - \left( -\frac{a^2}{n\pi} \right) = \frac{a^2}{n\pi},$$

og det siste integralet blir null siden  $\sin(n\pi) = 0$ . Dermed får vi:

$$\int_0^a (a - x) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{a^2}{n\pi}.$$

Setter vi dette inn igjen får vi:

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} A \frac{a^2}{n\pi} = \frac{\sqrt{6}}{n\pi} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Vi har nå funnet  $c_n$  og kan sette dette inn i den tidsavhengige løsningen sammen med  $\phi_n(x)$  fra forrige delkapittel:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Ved å sette inn uttrykkene får vi:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{\sqrt{6}}{n\pi} \right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{(-i \frac{n^2 \pi^2 \hbar}{2ma^2} t)}.$$

Uttrykket over gjenkjenner vi som en Fourier-sinusrad. Hver egenfunksjon  $\phi_n(x)$  utgjør et ledd i Fourier-rekken, og koeffisientene  $c_n$  spiller rollen som Fourier-koeffisientene. Alle funksjoner som tilfredsstiller randbetingelsene  $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$  kan skrives som en slik sum. Den valgte startfunksjonen  $A(a - x)$  er dermed representert som en Fourier-sum av sinusbølger med ulike frekvenser.

### 3.4 Partikkel i boks med endelig barriere

Etter å ha sett på partikkel-i-boks-problemet har vi fått en forståelse av hvordan kvantemekaniske systemer oppfører seg når de er fullstendig innestengt. I dette idealiserte tilfellet er veggene uendelig høye, slik at det potensielle energinivået utenfor boksen er uendelig stort. Partikkelen har dermed ingen mulighet til å slippe ut. Denne modellen er nyttig for å introdusere grunnleggende prinsipper som kvantisering av energi og formen på bølgefunksjonene.

I virkeligheten finnes det derimot sjelden uendelige barrierer. De fleste fysiske systemer består av endelige barrierer, der partikkelen har en viss sannsynlighet for å befinne seg utenfor selve brønnen. Dette gir et mer realistisk bilde av naturen.

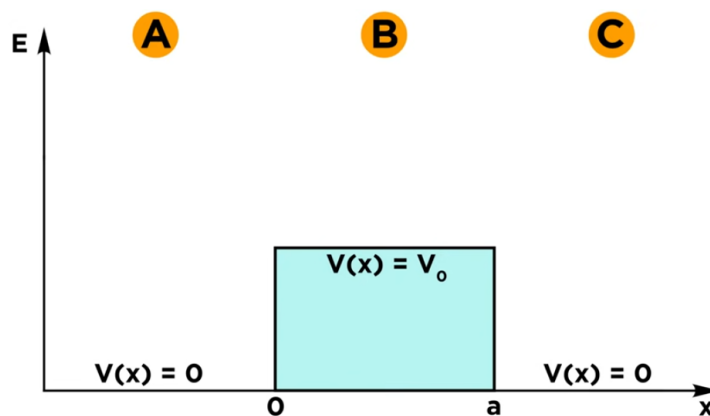
I denne delen bygger vi videre på partikkel-i-boks-modellen ved å erstatte de uendelige veggene med en endelig potensialbarriere. Vi skal undersøke hvordan bølgefunksjonen oppfører seg i de tre områdene — foran, inni og etter barrieren — og hvordan vi kan finne uttrykk for sannsynligheten for at partikkelen blir reflektert eller transmittert gjennom barrieren. [10]

#### 3.4.1 Modellering og potensialdefinisjon

Potensialet i dette problemet er definert slik at

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & 0 \leq x \leq a, \\ 0, & x > a. \end{cases}$$

I dette problemet med endelige barrierer ser vi på en partikkel som har lavere energi enn barrierens potensial. Fenomenet som oppstår i en slik situasjon kalles *kvantetunnelering*. Vi skal bruke schrödingerligningen til å beskrive dette matematisk, og finne sannsynligheten for at partikkelen passerer gjennom barrieren til tross for manglende energi. [11]



Figur 2: Energipotensialet kvante tunnelering

#### 3.4.2 Løsning av schrödingerligningen og Betingelser

På figuren deler vi inn områdene i seksjon A, B og C, ettersom dette gjør det enklere å definere bølgefunksjonene gjennom schrödingerligningen. Med den samme logikken som

ble brukt i partikkel-i-boks problemet, bruker vi også her den tidsuavhengige schrödingerligningen med hensyn på energipotensialet i de tre sektorene. Ettersom  $V(x)$  nå er bestemt  $V_o$  vil ligningen se litt annerledes ut. Schrödingerligningen blir uttrykt slik:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + \hat{V}(\hat{x})\psi(x) = E\psi(x)$$

De matematiske modifikasjonene av schrödingerligningen som ble brukt i forrige problem, kan også brukes her. Vi starter med å løse for seksjonene A og C, ettersom de begge består av  $V(x) = 0$ . I disse sektorene kan partikkelen bevege seg fritt, og kan dermed behandles likt som partikkelen i forrige problem. Siden  $V(x) = 0$  kan vi dermed sette dette inn i ligningen, som gjør at vi ender opp med samme uttrykk som vi hadde i sted

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = E\psi(x)$$

Deretter utfører vi de samme stegene som i forrige problem hvor vi ender opp med et andregrads differensialligning:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k_o^2 \psi, \quad \text{der } k_o = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k_o^2 \psi = 0$$

Den eneste forskjellen her er at vi setter  $k$  som  $k_o$ , ettersom vi blir nødt til å definere flere  $k$ -er senere. Ettersom vi allerede har løst denne andregrads differensialligningen fra partikkel-i-boks-problemet, vet vi hva den generelle løsningen for bølgefunksjonen er. Den eneste grunnen til at vi ikke får eksakt samme løsning som fra partikkel-i-boks-problemet er fordi vi må ta hensyn til andre grensebetingelser. Vi får da bølgefunksjonene for sektor A og C:

$$\begin{aligned} \psi_A(x) &= Ae^{ik_o x} + Be^{-ik_o x} \\ \psi_C(x) &= Ce^{ik_o x} + De^{-ik_o x} \end{aligned}$$

For å løse for sektor B blir det litt mer komplisert, ettersom partikkelen ikke lenger kan bevege seg fritt. Vi har nå en barriere som vi må forholde oss til, så istedet for å sette  $V(x) = 0$ , så sier vi at  $V(x) = V_o$ . Ligningen vil da se slik ut:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V_o \psi(x) = E\psi(x)$$

Med dette blir vi nødt til å ta hensyn til partikkelens energi. Hvis partikkelens energi er

lavere enn barrierens potensielle energi,  $E < V_o$ , er energien lavere enn barrierens høyde og kan da tenkes som å være ” inni ” barrieren. Det vi ønsker å oppnå er å hvordan bølgefunksjonen ser ut i dette tilfellet. Matematisk sett kan vi ikke lenger bruke de samme funksjonene med komplekse eksponensialer, siden potensialet ikke lenger er null. Vi må nå bruke reelle eksponensialer, ettersom dette representerer en reell barriere.

Så overordnet sett må seksjon B deles inn i 2 deler. En seksjon over barrieren der  $E > V_o$  representert av en bølgefunksjon med komplekse eksponensialer, og den andre seksjonen i barrieren der  $E < V_o$ , representert av en bølgefunksjon med reelle eksponensialer.

Vi kan starte med å løse for  $E < V_o$ , altså når partikkelener lavere enn barrierehøyden.

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V_o \psi(x) &= E \psi(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V_o \psi(x) - E \psi(x) &= 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + (V_o - E) \psi(x) &= 0 \end{aligned}$$

Videre ganger vi inn  $-\frac{2m}{\hbar^2}$  på begge sider av ligningen, for så å definere  $k$ . Siden uttrykket er den nedre delen av sektor B, kan vi kalle uttrykket for  $k_{\text{below}}$ .

$$\begin{aligned} -\frac{2m}{\hbar^2} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (V_o - E) \psi \right) &= -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot 0 \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V_o - E) \psi &= 0 \\ k_{\text{below}} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_o - E)} \end{aligned}$$

Dette gjør at hele uttrykket kan skrives om til:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - k_{\text{below}}^2 \psi = 0$$

Med denne andregrads differensialligningen kan vi videre løse til en lineær kombinasjon med reelle eksponensialer:

$$\psi_{B, \text{ below}}(x) = F e^{k_{\text{below}} x} + G e^{-k_{\text{below}} x}$$

Videre ser vi på bølgefunksjonen over barrieren, når  $E > V_o$ . I dette tilfellet er  $E$  større enn  $V_o$ . Legg merke til at  $V_o - E$  har nå byttet til  $E - V_o$ . Schrödingerligningen blir omgjort slik:



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + (E - V_0) \psi(x) = 0$$

$$k_{\text{above}} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - k_{\text{above}}^2 \psi = 0$$

Løsningen av denne andregrads differensialligningen blir en lineær kombinasjon av komplekse eksponentialer, akkurat som i seksjon A og C:

$$\psi_{B, \text{ above}}(x) = H e^{ik_{\text{above}}x} + K e^{-ik_{\text{above}}x}$$

Nå som vi har definert bølgefunksjonene i de ulike sektorene, kan vi igjen splitte de opp med tanke på partikkelens retning. Vi ser først på bølgefunksjonene i sektor A og C, ettersom disse er like:

$$\begin{aligned} \psi_A(x) &= A e^{ik_0x} + B e^{-ik_0x} & \psi_C(x) &= C e^{ik_0x} + D e^{-ik_0x} \\ \psi_{\text{right},A}(x) &= A e^{ik_0x} & \psi_{\text{right},C}(x) &= C e^{ik_0x} \\ \psi_{\text{left},A}(x) &= B e^{-ik_0x} & \psi_{\text{left},C}(x) &= D e^{-ik_0x} \end{aligned}$$

Disse representerer bølgefunksjonene i de ulike retningene. For eksempel på bølgefunksjonen i sektor A, så ser vi at  $\psi_{\text{right},A}(x)$  viser til bølgefunksjonen mot høyre, der A representerer relative sannsynligheten for at partikkelen beveger seg i denne retningen. Hvis  $A = 0$  i denne funksjonen, betyr dette at det er null sannsynlighet for at partikkelen beveger seg mot høyre.

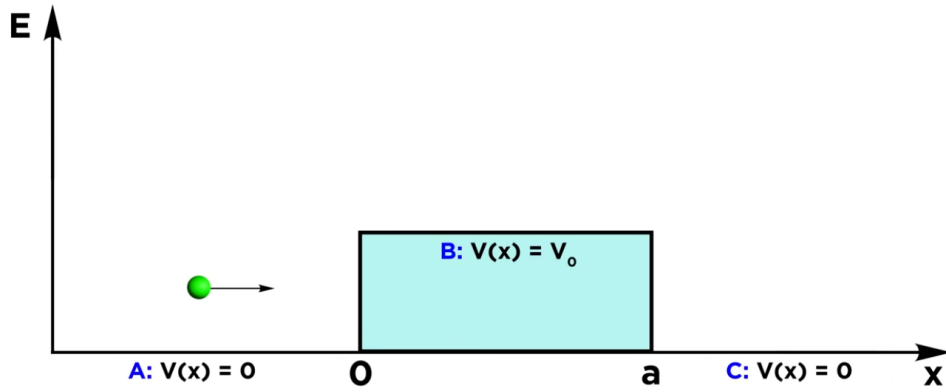
For seksjon B lar ikke  $\psi_{B, \text{ below}}(x)$  splitte opp, ettersom funksjonen uttrykkes ved reelle eksponentialer og dermed ikke tilsvarer en propagert bølge.  $\psi_{B, \text{ above}}(x)$  derimot kan igjen splittes opp til:

$$\psi_{B, \text{ above}}(x) = H e^{ik_{\text{above}}x} + K e^{-ik_{\text{above}}x}$$

$$\psi_{\text{right},B}(x) = H e^{ik_{\text{above}}x}$$

$$\psi_{\text{left},B}(x) = K e^{-ik_{\text{above}}x}$$

Nå som alle bølgefunksjonene er definert i sektorer og retninger kan vi begynne å løse kvante tunnelerings problemet. Vi antar at vi har et partikkel i sektor A som beveger seg i retning mot den endelige barrieren.



Figur 3: Partikkel som beveger seg mot barrieren

Ut fra disse antagelsene, kan det ikke komme bølger fra sektor C i retning mot barrieren, som betyr at  $D = 0$ :

$$\psi_{\text{left},C}(x) = 0e^{-ik_0x}$$

Alle de andre konstantene,  $A, B, C, F, G, H, K$ , har alle en mulig verdi. Dette er fordi partikkelen kan bevege seg mot høyre i alle sektorene. I sektor A kan den også reflektere etter kontakt med barrieren, som fører til at partikkelen også kan bevege seg mot venstre. partikkelen kan også bevege seg mot venstre inni selve barrieren ettersom den kan trenge gjennom barrieren til en viss grad og deretter reflektere tilbake igjen.

La oss nå ta for oss tilfellet  $E < V_0$  med hensyn til randbetingelsene, samt løsningen til schrödingerligningen. Akkurat som i partikkel-i-boks-problemet med uendelige potensialbarrierer, må vi her bestemme betingelsene som sikrer at både bølgefunksjonen og dens deriverte er kontinuerlige i hele det aktuelle området. Bølgefunksjonen må også være normalisert, noe som betyr at integralet over det relevante området av bølgefunksjonen multiplisert med dens komplekskonjugerte må være lik 1.

Vi starter med å undersøke randbetingelsen  $x = 0$ . Dette er randbetingelsen som er mellom sektor A og B. I denne posisjonen må

$$\psi_A = \psi_{b,\text{below}}$$

Ved å sette disse uttrykkene lik hverandre sørger vi for at bølgefunksjonen er kontinuerlig ved randbetingelsen, uavhengig av energien, og at den samtidig beskriver både transmisjon og refleksjon ved barrieren. Vi setter så inn det fullstendige uttrykket:

$$Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x} = Fe^{k_{\text{below}}x} + Ge^{-k_{\text{below}}x}$$

Vi setter inn  $x = 0$  inn i uttrykket

$$A + B = F + G$$

Videre ser vi på at den deriverte skal også være like ved denne randbetingelsen:

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi_A = \frac{\partial}{\partial x}\psi_{B,\text{below}}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x}) = \frac{\partial}{\partial x}(Fe^{k_{\text{below}}x} + Ge^{-k_{\text{below}}x})$$

$$ik_0Ae^{ik_0x} - ik_0Be^{-ik_0x} = k_{\text{below}}Fe^{k_{\text{below}}x} - k_{\text{below}}Ge^{-k_{\text{below}}x}$$

$$ik_0A - ik_0B = k_{\text{below}}F - k_{\text{below}}G$$

Videre gjør vi tilsvarende for randbetingelsen  $x = a$ , hvor vi får uttrykket:

$$\psi_{b,\text{below}} = \psi_c$$

$$Fe^{k_{\text{below}}x} + Ge^{-k_{\text{below}}x} = Ce^{ik_0x} + De^{-ik_0x}$$

Ettersom  $D = 0$  blir ligningen slik:

$$Fe^{k_{\text{below}}x} + Ge^{-k_{\text{below}}x} = Ce^{ik_0x}$$

$$Fe^{k_{\text{below}}a} + Ge^{-k_{\text{below}}a} = Ce^{ik_0a}$$

Tilslutt finner vi uttrykket for at de deriverte funksjonene skal være like ved randbetingelsen:

$$\frac{d}{dx}(Fe^{k_{\text{below}}x} + Ge^{-k_{\text{below}}x}) = \frac{d}{dx}(Ce^{ik_0x})$$

$$k_{\text{below}}Fe^{k_{\text{below}}x} - k_{\text{below}}Ge^{-k_{\text{below}}x} = ik_0Ce^{ik_0x}$$

$$k_{\text{below}}Fe^{k_{\text{below}}a} - k_{\text{below}}Ge^{-k_{\text{below}}a} = ik_0Ce^{ik_0a}$$

Tilsammen har vi løst schrödingerligningen, med et system bestående av disse fire ligningene med fem variabler:

$$A + B = F + G$$

$$ik_0A - ik_0B = k_{\text{below}}F - k_{\text{below}}G$$

$$Fe^{k_{\text{below}}a} + Ge^{-k_{\text{below}}a} = Ce^{ik_0a}$$

$$k_{\text{below}}Fe^{k_{\text{below}}a} - k_{\text{below}}Ge^{-k_{\text{below}}a} = ik_0Ce^{ik_0a}$$

Vi skal nå videre ta i bruk disse ligningene til å forklare fenomenet kvante tunnelering. Som tidligere nevnt er det en ikke-null sannsynlighet for at partikkelentransmitteres gjennom barrieren. For å kvantifisere sannsynligheten for at dette skjer må vi definere det som

kalles for transmisjonskoeffisienten. Denne defineres ved å se på sannsynligheten for at et partikkel beveger seg mot høyre i sektor C i forhold med et partikkel som beveger seg mot barrieren i sektor A. Vi kan se på hvordan bølgefunksjonene ser ut i disse sektorene:

$$\begin{aligned}\psi_A(x) &= Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x} & \psi_C(x) &= Ce^{ik_0x} \\ \psi_A(x) &= \psi_{A,\text{right}} + \psi_{A,\text{left}} & \psi_C(x) &= \psi_{C,\text{right}}\end{aligned}$$

Det vi kan gjøre videre er å definere sannsynlighetstettheten, altså sannsynligheten for å finne partikkelen som beveger seg i en gitt retning, ved hjelp av sannsynlighetstetthetsfunksjonen:

$$P_{A,\text{right}} = \psi_{A,\text{right}}^* \psi_{A,\text{right}} = (A^* e^{-ik_0x}) (Ae^{ik_0x}) = A^* A$$

$$P_{A,\text{left}} = \psi_{A,\text{left}}^* \psi_{A,\text{left}} = (B^* e^{ik_0x}) (Be^{-ik_0x}) = B^* B$$

$$P_{C,\text{right}} = \psi_{C,\text{right}}^* \psi_{C,\text{right}} = (C^* e^{-ik_0x}) (Ce^{ik_0x}) = C^* C$$

Med disse uttrykkene kan vi finne transmisjonskoeffisienten  $T$  og refleksjonskoeffisienten  $R$ . Transmisjonskoeffisienten defineres som sannsynligheten for å finne partikkelen som beveger seg mot høyre fra sektor C, i forhold med sannsynligheten for å finne partikkelen som beveger seg mot barrieren i sektor A:

$$T = \frac{P_{C,\text{right}}}{P_{A,\text{right}}} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = |t|^2$$

Dette representerer sannsynligheten for at kvante tunnelering kan skje. På samme måte kan vi definere refleksjonskoeffisienten gitt ved:

$$R = \frac{P_{A,\text{left}}}{P_{A,\text{right}}} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = |r|^2$$

Dette representerer sannsynligheten for at partikkelen kan bli reflektert av barrieren. Forholdet mellom  $T$  og  $R$  sier noe om sannsynligheten for at partikkelentransmitterer eller reflekterer. Eksempelvis hvis en partikkel har høyere energi enn barrieren, vil  $T$  være større enn  $R$ , mens hvis en partikkel har lavere energi enn barrieren vil  $R$  være større enn  $T$ .

Videre omgjør vi de fire ligningene ved å omgjøre  $C/A = t$ :

$$1 + r = f + g \tag{1}$$

$$ik_0 - ik_0 r = k_{\text{below}} f - k_{\text{below}} g \tag{2}$$

$$f e^{k_{\text{below}} a} + g e^{-k_{\text{below}} a} = t e^{ik_0 a} \tag{3}$$

$$k_{\text{below}} f e^{k_{\text{below}} a} - k_{\text{below}} g e^{-k_{\text{below}} a} = ik_0 t e^{ik_0 a} \tag{4}$$

Det er denne  $t$ -en vi ønsker å isolere, ettersom dette gir oss transmisjonsfaktoren. Dette gjøres ved noen matematiske manipulasjoner:

$$k_{\text{below}} f e^{k_{\text{below}} a} + k_{\text{below}} g e^{-k_{\text{below}} a} = k_{\text{below}} t e^{ik_0 a} \quad (3)$$

$$k_{\text{below}} f e^{k_{\text{below}} a} - k_{\text{below}} g e^{-k_{\text{below}} a} = ik_0 t e^{ik_0 a} \quad (4)$$

Vi kan finne f ved å legge sammen (3) + (4)

$$k_{\text{below}} f e^{k_{\text{below}} a} + k_{\text{below}} g e^{-k_{\text{below}} a} = k_{\text{below}} t e^{ik_0 a} \quad (3)$$

$$2k_{\text{below}} f e^{k_{\text{below}} a} = ik_0 t e^{ik_0 a} + k_{\text{below}} t e^{ik_0 a} \quad (4)$$

$$f = \frac{ik_0 t e^{ik_0 a} + k_{\text{below}} t e^{ik_0 a}}{2k_{\text{below}} e^{k_{\text{below}} a}} \quad (4)$$

$$f = t e^{ik_0 a} e^{-k_{\text{below}} a} \frac{ik_0 + k_{\text{below}}}{2k_{\text{below}}} \quad (4)$$

$$f = \frac{t e^{(ik_0 - k_{\text{below}})a} (ik_0 + k_{\text{below}})}{2k_{\text{below}}} \quad (4)$$

deretter kan vi finne g ved å subtrahere (3) – (4)

$$k_{\text{below}} f e^{k_{\text{below}} a} + k_{\text{below}} g e^{-k_{\text{below}} a} = k_{\text{below}} t e^{ik_0 a} \quad (3)$$

$$k_{\text{below}} f e^{k_{\text{below}} a} - k_{\text{below}} g e^{-k_{\text{below}} a} = ik_0 t e^{ik_0 a} \quad (4)$$

$$k_{\text{below}} f e^{k_{\text{below}} a} + k_{\text{below}} g e^{-k_{\text{below}} a} = k_{\text{below}} t e^{ik_0 a} \quad (3)$$

$$-2k_{\text{below}} g e^{-k_{\text{below}} a} = ik_0 t e^{ik_0 a} - k_{\text{below}} t e^{ik_0 a} \quad (4)$$

$$g = \frac{t e^{(ik_0 + k_{\text{below}})a} (k_{\text{below}} - ik_0)}{2k_{\text{below}}} \quad (4)$$

Etter at f og g er definert, ser vi nærmere på ligningene 1 og 2:

$$1 + r = f + g \quad (1)$$

$$ik_0 + ik_0 r = ik_0 f + ik_0 g \quad (1)$$

$$ik_0 - ik_0 r = k_{\text{below}} f - k_{\text{below}} g \quad (2)$$

Når vi legger disse to ligningene sammen får vi

$$2ik_0 = (ik_0 + k_{\text{below}}) f + (ik_0 - k_{\text{below}}) g$$

Videre setter vi inn for f og g:

$$2ik_0 = (ik_0 + k_{\text{below}}) \frac{te^{(ik_0 + k_{\text{below}})a} (ik_0 + k_{\text{below}})}{2k_{\text{below}}} + (ik_0 - k_{\text{below}}) \frac{te^{(ik_0 + k_{\text{below}})a} (ik_0 - k_{\text{below}})}{-2k_{\text{below}}}$$

som videre kan simplifiseres til

$$2ik_0 = [e^{k_{\text{below}}a} (-k_0^2 + k_{\text{below}}^2 + 2ik_0k_{\text{below}}) - e^{-k_{\text{below}}a} (-k_0^2 + k_{\text{below}}^2 - 2ik_0k_{\text{below}})] \frac{te^{ik_0}}{2k_{\text{below}}}$$

$$2ik_0 = [-(-k_0^2 + k_{\text{below}}^2) 2 \sinh(k_{\text{below}}a) + (2ik_0k_{\text{below}}) 2 \cosh(k_{\text{below}}a)] \frac{te^{ik_0}}{2k_{\text{below}}}$$

Med dette uttrykket kan vi tilslutt isolere t for seg selv:

$$t = \frac{4ik_0k_{\text{below}}e^{-ik_0}}{(k_0^2 - k_{\text{below}}^2) 2 \sinh(k_{\text{below}}a) + (2ik_0k_{\text{below}}) 2 \cosh(k_{\text{below}}a)}$$

Vi kan simplifisere dette uttrykket ved å sette inn noen konstanter inn i formelen, vi setter inn  $\gamma = (k_0^2 - k_{\text{below}}^2)$  og  $\kappa = 2k_0k_{\text{below}}$

$$t = \frac{2i\kappa e^{-ik_0}}{\gamma 2 \sinh(k_{\text{below}}a) + i\kappa 2 \cosh(k_{\text{below}}a)}$$

Videre finner vi uttrykket for T, gitt ved  $|t^2|$

$$T = \frac{4\kappa^2}{4\gamma^2 \sinh^2(k_{\text{below}}a) + 4\kappa^2 \cosh^2(k_{\text{below}}a)}$$

Videre kan vi bruke uttrykket  $\cosh^2(x) - \sinh^2(x) = 1$  for å bare få  $\sinh^2$  i uttrykket:

$$\cosh^2(x) = 1 + \sinh^2(x)$$

$$T = \frac{\kappa^2}{\gamma^2 \sinh^2(k_{\text{below}}a) + \kappa^2 + \kappa^2 \sinh^2(k_{\text{below}}a)}$$

$$T = \frac{\kappa^2}{(\gamma^2 + \kappa^2) \sinh^2(k_{\text{below}}a) + \kappa^2}$$

$$T = \frac{1}{\left(\frac{\gamma^2}{\kappa^2} + 1\right) \sinh^2(k_{\text{below}}a) + 1}$$

Deretter setter vi konstantene vi har laget tilbake inn i uttrykket:

$$\gamma = k_0^2 - k_{\text{below}}^2$$

$$\kappa = 2k_0 k_{\text{below}}$$

$$k_{\text{below}} = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$$

$$k_0 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

Da ender vi opp med følgende uttrykk:

$$T = \frac{1}{\frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(k_{\text{below}} a) + 1}$$

Tilslutt for å gjøre uttrykket mer lesbart, setter vi inn konstanten  $\eta = E/V_0$ . Dette gjør at vi får den endelige sluttformen:

$$T = \left( 1 + \frac{\sinh^2(k_{\text{below}} a)}{4\eta(1 - \eta)} \right)^{-1} \quad \text{hvor } \eta = \frac{E}{V_0} \quad \left| \quad k_{\text{below}} = \frac{\sqrt{2mV_0(1 - \eta)}}{\hbar} \right.$$

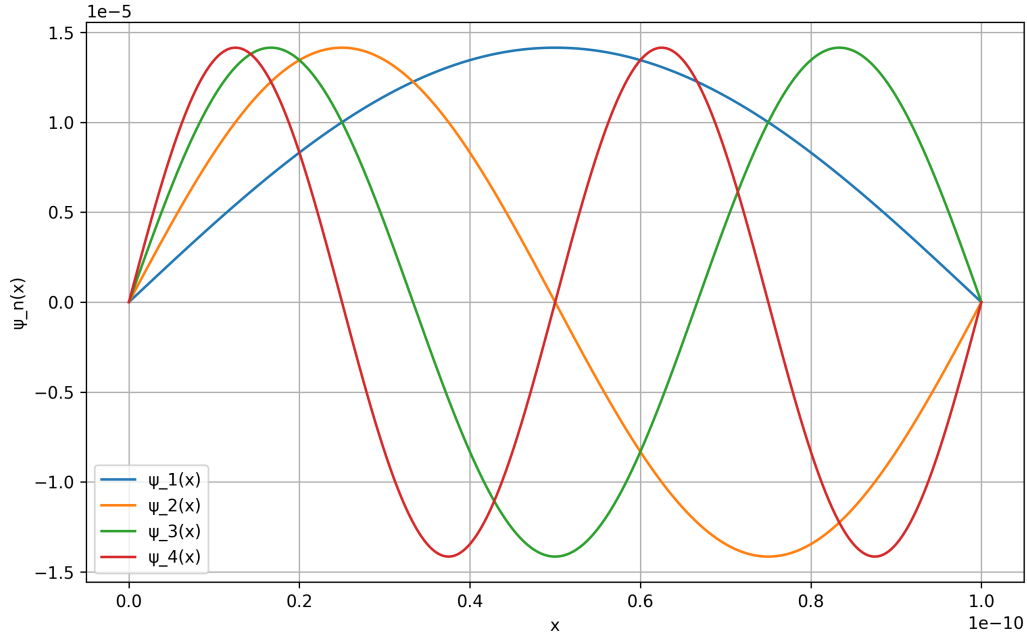
Vi vet fra teoridelen at  $T + R = 1$ . partikkelen vil enten transmittere eller reflektere, det er ingen andre muligheter. Derfor kan vi flytte på ligningen for å få Refleksjonskoeffisienten R med uttrykket:

$$R = 1 - T$$

## 4 Resultater

### 4.1 Partikkel i boks med uendelig potensiale

#### 4.1.1 Tidsuavhengig bølgefunksjon



Figur 4: Tidsuavhengig bølgefunksjon fra  $n \in [1, 4] \cap \mathbb{Z}$

Vår første simulering (figur 4) viser bølgefunksjonene til de respektive energinivåene fra  $n = 1$  til  $n = 4$ . Bølgefunksjonene ble beregnet for de fire laveste energinivåene ved hjelp av uttrykket

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right),$$

der parameterne er gitt ved

$$a = 1 \times 10^{-10} \text{ m}, \quad m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}, \quad \hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}.$$

Disse parameterverdiene danner grunnlaget for de videre beregningene og simuleringene som presenteres i rapporten.

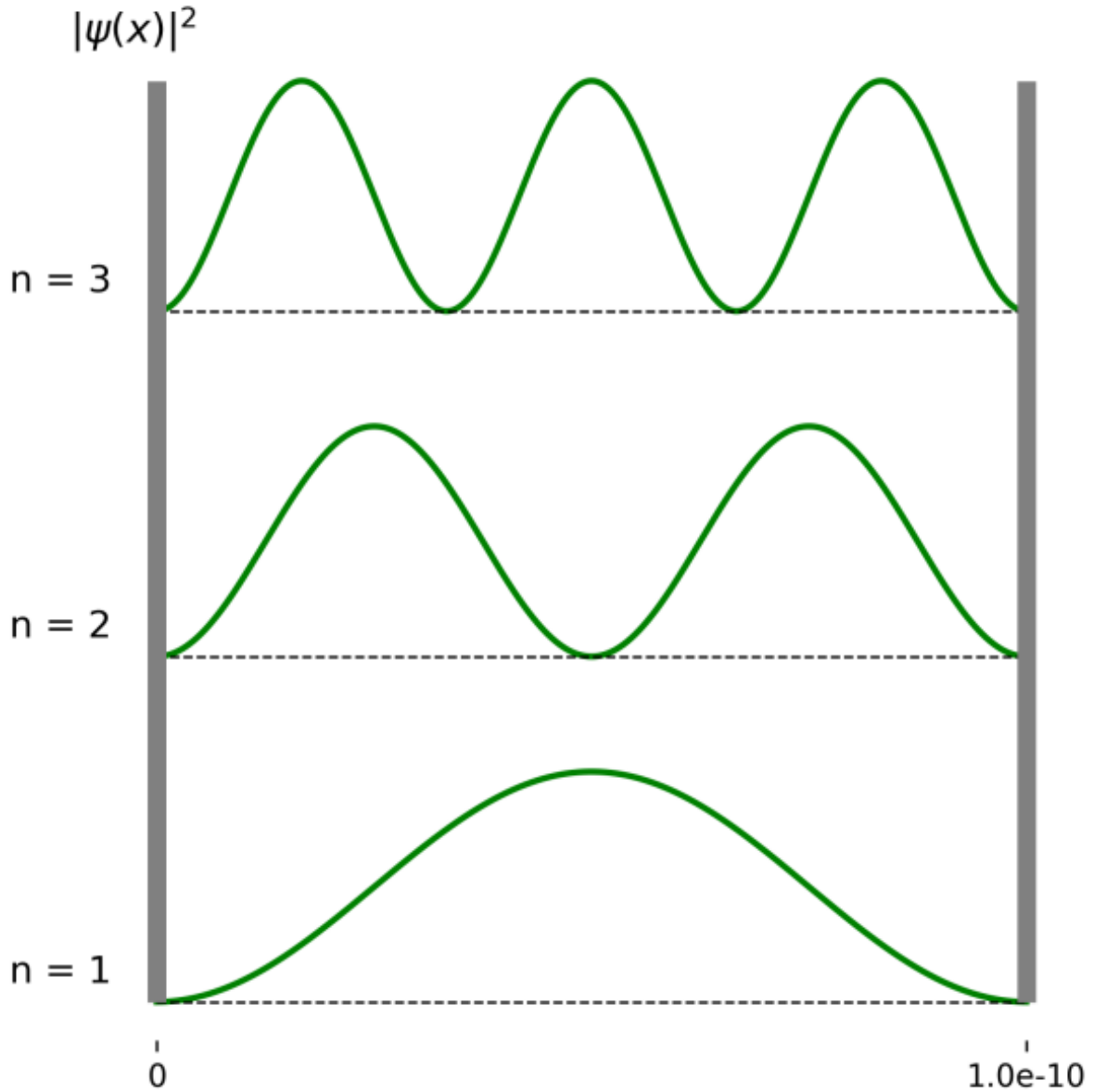
De tilhørende energinivåene til bølgefunksjonene er gitt ved:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$



$n$	$E_n$ [eV]
1	3.76
2	15.0
3	33.9
4	60.3

Tabell 1: Beregnete energinivåer for en partikkel i en uendelig potensialbrønn med  $a = 1 \times 10^{-10}$  m.

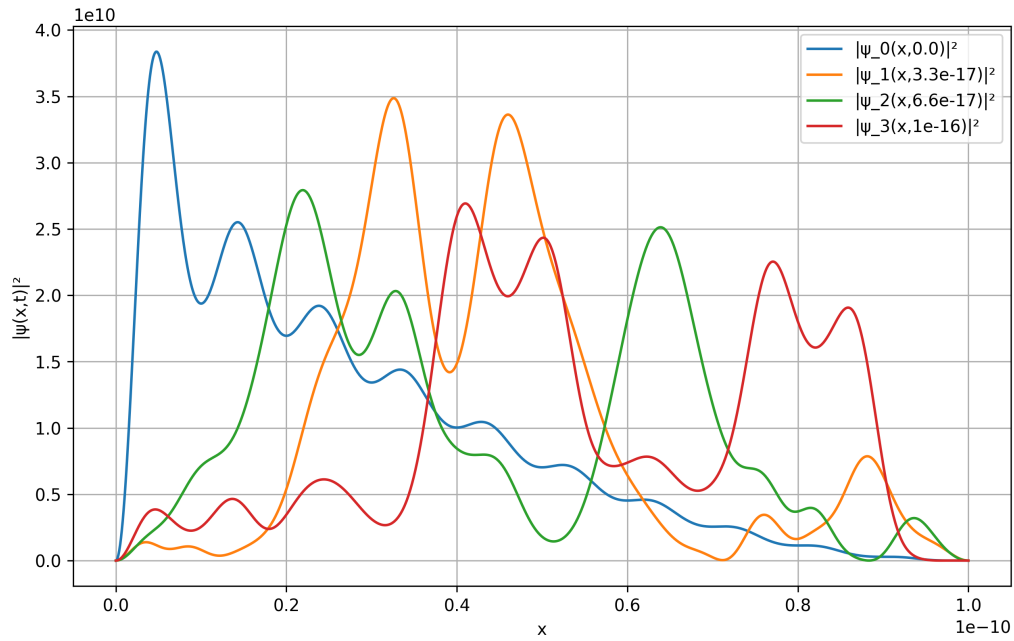


Figur 5: Sannsynlighetstetthet for partikkel i uendelig potensialbrønn  $n \in [1, 3] \cap \mathbb{Z}$

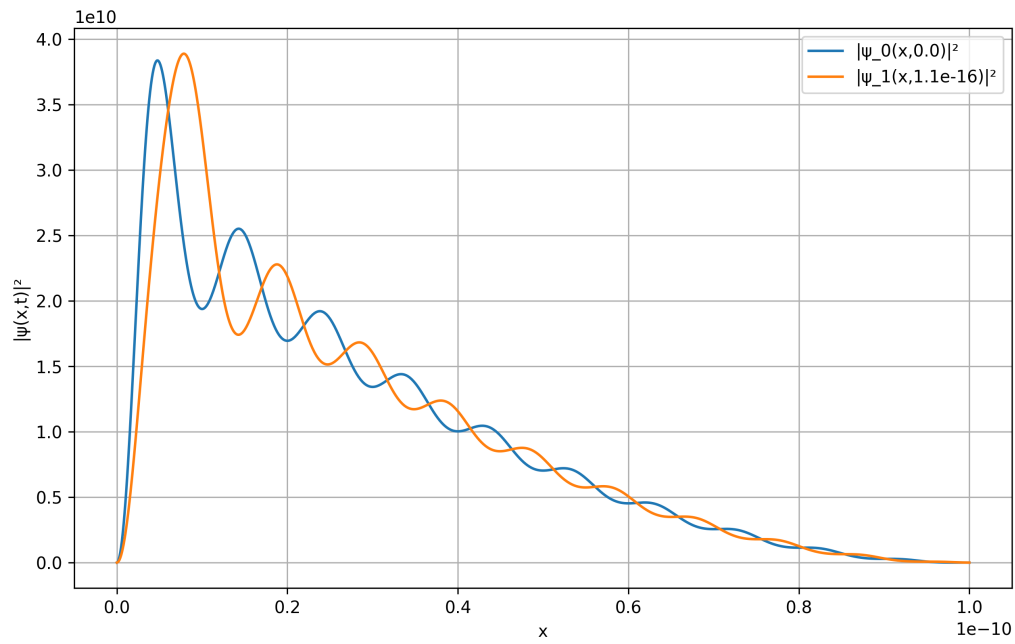
I modellen over (Figur 5), så blir sannsynlighetstettheten for partikkelen i de forskjellige energinivåene visualisert. De grå veggene er de uendelig potensialveggene og den grønne kurven viser verdien til absoluttverdien av bølgefunksjonen i andre ( $|\psi(x)|^2$ ).

### 4.1.2 Tidsavhengig bølgefunksjon

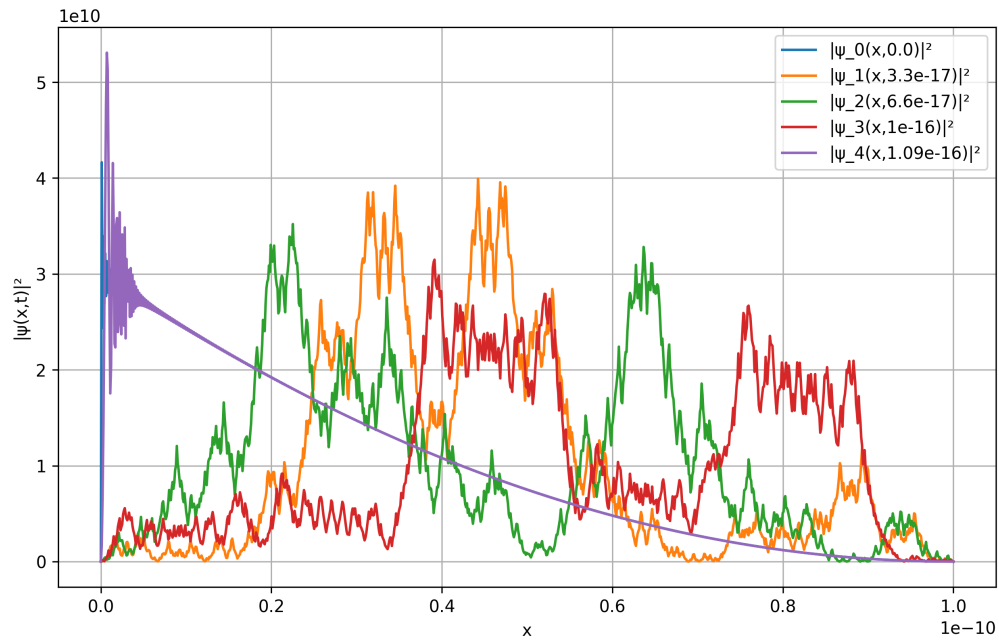
Vi har simulert den tidsavhengige bølgefunksjonen for et elektron i en én-dimensjonal boks med  $a = 1 \cdot 10^{-10}$ . Figurene under viser sannsynlighetstettheten  $|\Psi(x, t)|^2$  for ulike tidspunkter  $t$  og energinivåer  $n$ .



Figur 6: Tidsavhengig bølgefunksjon der  $n \in [1, 20] \cap \mathbb{Z}$  og  $t \in \{0, 3.3 \cdot 10^{-17}, 6.6 \cdot 10^{-17}, 1 \cdot 10^{-16}\}$

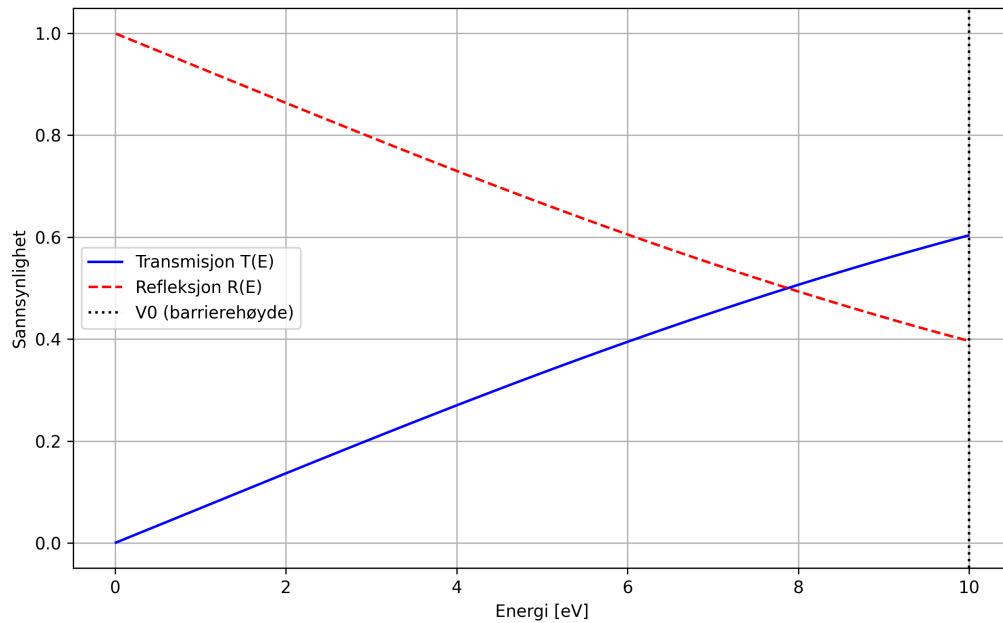


Figur 7: Tidsavhengig bølgefunksjon der  $n \in [1, 20] \cap \mathbb{Z}$  og  $t \in \{0, 1.1 \cdot 10^{-10}\}$



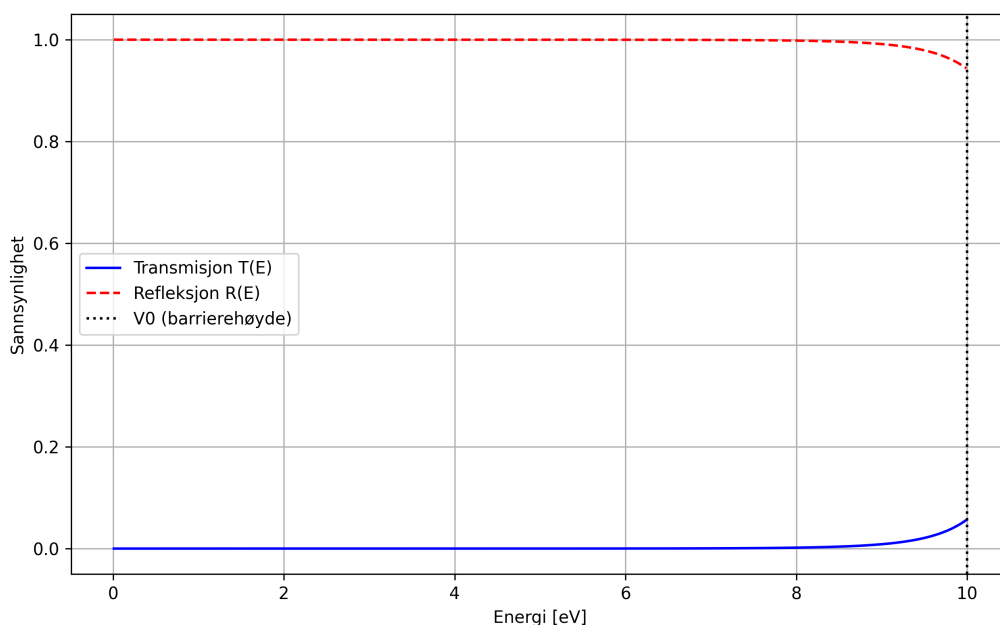
Figur 8: Tidsavhengig bølgefunksjon der  $n \in [0, 1000] \cap \mathbb{Z}$  og  $t \in \{0, 3.3 \cdot 10^{-17}, 6.6 \cdot 10^{-17}, 1.0 \cdot 10^{-16}, 1.09 \cdot 10^{-16}\}$

## 4.2 Partikkel i boks med endelig potensial



Figur 9: Forhold mellom R og T - liten barriere

På figur 9 er det vist en simulering av et elektron i en endelig potensialbrønn med bredde  $a = 10^{-10}$  m. Potensialenergien til barrieren er satt til  $V_0 = 10$  eV.  $E$  blir grafisk plottet og er delt inn i 1000 punkter med intervall på  $(0.001 * V_0)$  til  $(0.999 * V_0)$ .



Figur 10: Forhold mellom R og T - stor barriere

På figur 10 er det vist en simulering av et elektron i en endelig potensialbrønn med bredde  $a = 5 \cdot 10^{-10}$  m. Potensialenergien til barrieren er satt til  $V_0 = 10$  eV. E blir grafisk plottet og er delt inn i 1000 punkter med intervall på  $(0.001 * V_0)$  til  $(0.999 * V_0)$ .

## 5 Diskusjon

### 5.1 Den tidsuavhengige bølgefunksjonen

Fra resultatene på figur 4 ser vi at det ikke bare finnes én bølgefunksjon som beskriver systemet. Vi ser fire forskjellige bølgefunksjoner med dets korresponderende energinivå. Ut fra uttrykket

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right),$$

ser vi at det vil være  $n \in [1, \infty] \cap \mathbb{Z}$  bestemte energinivåer  $E_n$  til en korresponderende mengde bølgefunksjoner.

$$\psi_1 \Rightarrow 3.76 \text{ eV}$$

$$\psi_2 \Rightarrow 15.0 \text{ eV}$$

$$\psi_3 \Rightarrow 33.9 \text{ eV}$$

$$\psi_4 \Rightarrow 60.3 \text{ eV}$$

Dette resultatet bekrefter at energi i kvantemekanikken er kvantisert, i sterk kontrast til

klassisk fysikk hvor partikkelen kunne hatt en kontinuerlig rekke av kinetiske energier.

En konsekvens av kvantiseringen ser vi allerede i grunntilstanden ( $n = 1$ ): tilstedeværelsen av nullpunktsenergi ( $E_1 = 3.76$  eV). Det faktum at partikkelens laveste energi er større enn null betyr at den aldri kan være helt i ro, selv i sin mest stabile tilstand. Dette skyldes Heisenbergs usikkerhetsprinsipp

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Siden partikkelen er begrenset til boksens lengde ( $a$ ), er usikkerheten i posisjon ( $\Delta x$ ) endelig, noe som tvinger usikkerheten i bevegelsesmengde ( $\Delta p$ ) til å være stor nok til å hindre energien fra å nå null.

Vi ser også at antall halvbølger i bølgefunksjonen tilsvarer antall  $n$  i energinivået. Hvis vi ser tilbake til randbetingelsene som er pålagt i modellen, ser vi at bølgefunksjonen må være null ved boksens vegger  $\psi(0) = 0$  og  $\psi(a) = 0$  ettersom det ikke skal være fysisk mulig for partikkelen å være noe sted utenfor boksen. Dette tilsvarer at sannsynlighetstetthsfunksjonen, samt bølgefunksjonen må være lik null. Dette gjør igjen at bølgetallet  $k$  må oppfylle betingelsen

$$ka = n\pi$$

som betyr kun de bølgelengdene som passer inn som et eksakt antall halvbølger i boksens lengde ( $a$ ) er tillatt.

Fra resultatene på figur 5 ser vi noe mer konkret, ettersom det viser sannsynligheten for hvor partikkelen kan befinne seg for de forskjellige energinivåene.

## 5.2 Den tidsavhengige bølgefunksjonen

Simuleringen som er vist i figur 6, 7 og 8 tar utgangspunkt i funksjonen  $A(x - a)$ , en lineær funksjon som avtar fra 0 til  $a = 1 \times 10^{-10}$  m. Denne brukes som startbetingelse for bølgefunksjonen og representerer sannsynlighetstettheten for å finne partikkelen i boksen ved  $t = 0$ . Den blå kurven i figur 6, som tilsvarer dette tidspunktet, viser tydelig denne startformen: amplituden synker gradvis fra 0 mot enden av boksen med jevnt avtagende bølgetopper.

Etter hvert som tiden utvikler seg, ser vi hvordan formen til sannsynlighetstettheten endrer seg markant. I simuleringen for figur 6 er det energinivåene fra  $n = 0$  til  $n = 20$  som bidrar til den totale bølgefunksjonen. Vi observerer derfor en tydelig endring i grafens form over de ulike tidsintervallene. Dersom antallet energinivåer hadde vært lavere, ville bølgefunksjonen vist færre og enklere svingninger. I figur 8, der flere energinivåer er inkludert, ser vi flere amplituder og mer komplekse mønstre. Dette skyldes at summen av flere energinivåer danner mer kompliserte interferensmønstre i både rom og tid.

For å forstå dette må vi se nærmere på hva fenomenet egentlig representerer. I den tidsuavhengige løsningen av schrödingerligningen fikk vi stasjonære bølger, men en partikkel i en boks kan ikke beskrives som bare én bølge når den ikke er i en stasjonær tilstand. I stedet beskrives den som en superposisjon av mange stasjonære bølger  $\psi_n$ , som alle

eksisterer samtidig. Den totale bølgefunksjonen kan skrives som en lineær kombinasjon av disse tilstandene med forskjellige energinivåer, der hvert bidrag får en tidsavhengig fasefaktor av typen

$$e^{-iE_nt/\hbar}.$$

Forskjellen i disse fasefaktorene skaper de tidsavhengige interferensmønstrene vi observerer.

Interferensen mellom de ulike bidragene fører til at sannsynlighetstettheten  $|\Psi(x, t)|^2$  oscillerer både i rom og tid. La oss stoppe litt her og tenke over hva dette egentlig betyr. Hvordan kan man egentlig si at noe oscillerer i tid?

At sannsynlighetstettheten oscillerer i rom er enklere å forstå – det betyr at sannsynligheten for å finne partikkelen varierer langs posisjonsaksen  $x$ . Noen steder i boksen er sannsynligheten høy, andre steder lav. Disse toppene og bunnene forflytter seg over tid som følge av interferens mellom de ulike energikomponentene.

Når vi sier at sannsynlighetstettheten oscillerer i tid, mener vi at formen på  $|\Psi(x, t)|^2$  endrer seg som en funksjon av tiden. Toppene forskyves, intensiteten varierer, og mønstret beveger seg. Dette skjer fordi hver energitilstand  $E_n$  i superposisjonen har sin egen faseutvikling. Når disse legges sammen, glir fasene ut av takt og kommer senere i takt igjen, noe som skaper periodiske forandringer i bølgeformen over tid – altså en oscillasjon i tid.

Slike endringer er et direkte resultat av kvantemekanisk superposisjon, der bølger fra forskjellige energinivåer påvirker hverandre og danner dynamiske mønstre.

Det er viktig å forstå at grafene ikke viser en faktisk bevegelse av partikkelen, men en representasjon av hvordan sannsynligheten for å finne den endres. Partikkelen eksisterer ikke på et bestemt sted før en måling foretas – det vi ser er utviklingen av kvantetilstanden, ikke en klassisk bane.

Resultatene kan også tolkes gjennom Fourier-teori. Superposisjonen av mange sinusformede egenfunksjoner utgjør i realiteten en Fourier-representasjon av den opprinnelige startbetingelsen  $A(x - a)$ . Tidsutviklingen kan dermed forstås som en Fourier-rekke der fasene endres over tid.

Resultatet er en periodisk og dynamisk sannsynlighetsfordeling som illustrerer hvordan kvantetilstanden i et lukket system utvikler seg kontinuerlig, uten energiutveksling med omgivelsene.

### 5.2.1 Observasjon av gjentakende mønstre i bølgefunksjonen

I forrige delkapittel nevnte vi at fasene glir inn og ut av takt. Dette innebærer at bølgene følger et bestemt mønster over tid. I starten av simuleringen virket det som om bølgefunksjonen endret seg tilsynelatende tilfeldig, uten noen tydelig rytme eller struktur. Dette ser vi i figur 6, hvor sannsynlighetstettheten endrer form på en kompleks måte uten et gjenkjennelig mønster.

Etter hvert som vi utvidet tidsintervallet, ble det derimot tydelig at endringene ikke var vilkårlige. Bølgefunksjonen begynte gradvis å vende tilbake mot sin opprinnelige form ved  $t = 0$ . Etter flere tester med ulike tidsintervaller observerte vi at bølgefunksjonen gjentok

sin form etter et bestemt tidsintervall. I figur 7 ser vi at ved  $t = 1.1 \times 10^{-16}$  s har bølgefunksjonen nesten returnert til utgangspunktet.

Vi beregnet det nøyaktige tidspunktet der bølgefunksjonen er identisk med starttilstanden, men for å kunne visualisere fenomenet på en tydelig måte valgte vi å vise et tidspunkt som ligger svært nær dette. Dette illustrerer tydelig at bølgene følger en fast rytme der de glir ut av og inn i fase med hverandre. Fenomenet viser at systemet ikke endrer energi, men gjennomgår en periodisk utvikling der sannsynlighetsfordelingen gjentar seg over tid. Utslaget er større ved høyere samling av energinivåer som vi kan se i figur 8, men også her vil bølgeformen returnere til sin opprinnelige form.

### 5.3 Transmisjons- og refleksjonskoeffisienten

Når vi ser på resultatene fra partikkel-i-boks-problemet med endelige barrierer, kan vi tydelig se en sammenheng mellom transmisjon- og refleksjonskoeffisienten. Som tidligere nevnt er  $T$  er representasjon av sannsynligheten for at partikkelen passerer gjennom barrieren, mens  $R$  representerer sannsynligheten for at partikkelen blir reflektert tilbake. Vi kan da se at funksjonene er komplementære sannsynligheter, noe som tilsier at partikkelenbare kan enten transmittere eller reflektere, ikke noe annet.

$$T + R = 1$$

Dette beviser sannsynlighetsbevaringen i bølgefunksjonen, som da sier at sannsynligheten for å finne partikkelen i hele rommet må alltid være lik 1, altså 100%.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

Videre kan vi diskutere forholdet mellom energien  $E$  til partikkelen og potensialenergien  $V_0$  til barrieren. For å gjøre dette må vi se nærmere på funksjonsuttrykket til transmisjonskoeffisienten:

$$T = \left( 1 + \frac{\sinh^2(k_{\text{below}} a)}{4\eta(1 - \eta)} \right)^{-1}, \quad \text{der } \eta = \frac{E}{V_0}, \quad \text{og } k_{\text{below}} = \frac{\sqrt{2mV_0(1 - \eta)}}{\hbar}.$$

Gjennom dette prosjektet har vi vist hvordan Schrödingerligningen kan brukes til å beskrive partikkelens oppførsel både i et uendelig og et endelig potensial. Den uendelige modellen viser hvordan energien til partikkelen er kvantefisert og gir spesifikke bølgefunksjoner, mens den endelige modellen demonstrerer muligheten for kvantetunnelering. Her viser vi hvordan partikkelen kan passere en barriere til tross for utilstrekkelig energi i klassisk forstand. Simuleringene av den tidsuavhengige ligningen viste at vi fikk nullpunktenergi. Dette stemmer overens med Heisenbergs usikkerhetsprinsipp. Vi fant og at energinivået henger sammen med sannsynlighetstettheten. Antall bølgetopper er alltid likt energinivået. Den tidsavhengige løsningen viste at sannsynlighetstettheten oscillerer i både rom og tid som følge av interferens mellom stasjonære bølger. For systemet med endelige barrierer viste beregningene at transmisjonskoeffisienten  $T$  øker med partikkelens



energi og avtar med barrierebredden. Resultatene bekrefter at Schrödingerligningen gir en matematisk beskrivelse av partikkelens oppførsel på mikroskopisk nivå, og viser hvordan kvantemekaniske prinsipper som sannsynlighet, bølgefunksjon og energi kvantiseres i praksis. Selv om det har vært vanskelig for oss som gruppe å sette oss inn i kvantefysikkens verden, har prosjektet likevel gitt en økt forståelse for hvordan matematiske modeller kan brukes for å beskrive fysiske systemer, samt forskjellen mellom klassisk og kvantemekanisk fysikk.

## 6 Konklusjon

Gjennom dette prosjektet har vi vist hvordan Schrödingerligningen kan brukes til å beskrive partikkelens oppførsel både i et uendelig og et endelig potensial. Den uendelige modellen viser hvordan energien til partikkelen er kvantefisert og gir spesifikke bølgefunksjoner, mens den endelige modellen demonstrerer muligheten for kvantetunneling. Her viser vi hvordan partikkelen kan passere en barriere til tross for utilstrekkelig energi i klassisk forstand.

Simuleringene av den tidsuavhengige ligningen viste at vi fikk nullpunktenergi. Dette stemmer overens med Heisenbergs usikkerhetsprinsipp. Vi fant også at energinivået henger sammen med sannsynlighetstettheten. Antall bølgetopper er alltid likt energinivået.

Den tidsavhengige løsningen viste at sannsynlighetstettheten oscillerer i både rom og tid som følge av interferens mellom stasjonære bølger. For systemet med endelige barrierer viste beregningene at transmisjonskoeffisienten  $T$  øker med partikkelens energi og avtar med barrierebredden.

Resultatene bekrefter at Schrödingerligningen gir en matematisk beskrivelse av partikkelens oppførsel på mikroskopisk nivå, og viser hvordan kvantemekaniske prinsipper som sannsynlighet, bølgefunksjon og energi kvantiseres i praksis. Selv om det har vært vanskelig for oss som gruppe å sette oss inn i kvantefysikkens verden, har prosjektet likevel gitt en økt forståelse for hvordan matematiske modeller kan brukes for å beskrive fysiske systemer, samt forskjellen mellom klassisk og kvantemekanisk fysikk.

## 7 Litteraturreferanser

- [1] J. Linder. «bølgefunksjon.» Store norske leksikon, sjekket 7. okt. 2025. adresse: <https://snl.no/b%C3%B8lgefunksjon>.
- [2] Wikipedia. «Wave function,» sjekket 7. okt. 2025. adresse: [https://en.wikipedia.org/wiki/Wave\\_function](https://en.wikipedia.org/wiki/Wave_function).
- [3] Domain of Science. «The Quantum Wavefunction Explained.» YouTube, sjekket 7. okt. 2025. adresse: [https://www.youtube.com/watch?v=sOI4DlWQ\\_1w&list=LL&index=1](https://www.youtube.com/watch?v=sOI4DlWQ_1w&list=LL&index=1).
- [4] Britannica. «Euler's formula,» sjekket 7. okt. 2025. adresse: <https://www.britannica.com/science/Eulers-formula>.
- [5] Wikipedia. «Kvantemekanikk,» sjekket 7. okt. 2025. adresse: <https://no.wikipedia.org/wiki/Kvantemekanikk>.
- [6] J. Linder. «kvantetilstand.» Store norske leksikon, sjekket 7. okt. 2025. adresse: <https://snl.no/kvantetilstand>.
- [7] R. Feynman. «Erwin Schrödinger and Louis de Broglie,» sjekket 7. okt. 2025. adresse: <https://readingfeynman.org/2016/03/01/erwin-schrodinger-and-louis-de-broglie/>.
- [8] LibreTexts. «The Schrödinger Equation,» sjekket 7. okt. 2025. adresse: [https://math.libretexts.org/Bookshelves/Differential\\_Equations/Differential\\_Equations\\_\(Chasnov\)/09:\\_Partial\\_Differential\\_Equations/9.08:\\_The\\_Schrodinger\\_Equation](https://math.libretexts.org/Bookshelves/Differential_Equations/Differential_Equations_(Chasnov)/09:_Partial_Differential_Equations/9.08:_The_Schrodinger_Equation).
- [9] Professor Dave Explains. «Partikkel i boks med uendelig potensial-vegger,» sjekket 7. okt. 2025. adresse: <https://www.youtube.com/watch?v=LBB39u8dNw0>.
- [10] Professor Dave Explains. «Partikkel i boks med endelig barriere,» sjekket 7. okt. 2025. adresse: [https://www.youtube.com/watch?v=EMq\\_QbyghMU](https://www.youtube.com/watch?v=EMq_QbyghMU).
- [11] Professor Dave Explains. «Partikkel i boks med endelig barriere Part 2,» sjekket 7. okt. 2025. adresse: <https://www.youtube.com/watch?v=kUR98x1tH0c>.
- [12] Professor Dave Explains. «Partikkel i boks med uendelig potensial-vegger Part 2,» sjekket 7. okt. 2025. adresse: <https://www.youtube.com/watch?v=h8c21WIst0U>.

## 8 Vedlegg

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from scipy import constants
4
5 # Konstanter (bruk SI-enheter)
6 hbar = constants.hbar # Plancks reduserte konstant [J*s]
7 m = constants.m_e     # Elektronets masse [kg]
8 V0 = 10 * constants.e # Potensialhøyde [J] (10 eV)
9 a = 1e-10             # Barrierens bredde [m]
10
11 # Energistadier
12 E = np.linspace(0.001*V0, 0.999*V0, 1000, dtype=np.longdouble) #128b
    floats
13 kappa = np.sqrt(2 * np.longdouble(m) * (np.longdouble(V0) - E)) / np.
    longdouble(hbar) #128b floats
14
15 # Transmisjonskoeffisient for  $E < V_0$ 
16 T = 1 / (1 + (V0**2 * np.sinh(kappa * a)**2) / (4 * E * (V0 - E)))
17
18 # Refleksjon:  $R = 1 - T$ 
19 R = 1 - T
20
21 # Plot
22 plt.figure(figsize=(10, 6))
23 plt.plot(E / 1.602e-19, T, label="Transmisjon  $T(E)$ ", color="blue")
24 plt.plot(E / 1.602e-19, R, label="Refleksjon  $R(E)$ ", color="red",
    linestyle="--")
25
26 plt.axvline(V0 / 1.602e-19, color="black", linestyle=":", label="V0 (
    barrierehøyde)")
27 plt.xlabel("Energi [eV]")
28 plt.ylabel("Sannsynlighet")
29 plt.legend()
30 plt.grid(True)
31 plt.savefig("thinwall.png", dpi=300)
```

Program 1: Endelig potensial, tynn vegg

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from scipy import constants
4
5 # Konstanter (bruk SI-enheter)
6 hbar = constants.hbar # Plancks reduserte konstant [J*s]
7 m = constants.m_e     # Elektronets masse [kg]
8 V0 = 10 * constants.e # Potensialhøyde [J] (10 eV)
9 a = 5e-10             # Barrierens bredde [m]
10
11 # Energistadier
12 E = np.linspace(0.001*V0, 0.999*V0, 1000, dtype=np.longdouble) #128b
    float
13 kappa = np.sqrt(2 * np.longdouble(m) * (np.longdouble(V0) - E)) / np.
    longdouble(hbar) #128b float
14
15 # Transmisjonskoeffisient for E < V0
16 T = 1 / (1 + (V0**2 * np.sinh(kappa * a)**2) / (4 * E * (V0 - E)))
17
18 # Refleksjon: R = 1 - T
19 R = 1 - T
20
21 # Plot
22 plt.figure(figsize=(10, 6))
23 plt.plot(E / 1.602e-19, T, label="Transmisjon T(E)", color="blue")
24 plt.plot(E / 1.602e-19, R, label="Refleksjon R(E)", color="red",
    linestyle="--")
25
26 plt.axvline(V0 / 1.602e-19, color="black", linestyle=":", label="V0 (
    barrierehøyde)")
27 plt.xlabel("Energi [eV]")
28 plt.ylabel("Sannsynlighet")
29 plt.legend()
30 plt.grid(True)
31 plt.savefig("thickwall.png", dpi=300)

```

Program 2: Endelig potensial, tykk vegg

```

1 from scipy import constants
2 import numpy as np
3 import matplotlib.pyplot as plt
4
5 # Constants
6 hbar = constants.hbar
7 m = constants.m_e           #masse
8 a = 1e-10                   #boksens lengde
9
10 # Calculations
11
12 --coordinates--
13 x = np.linspace(0, a, 1000, dtype=np.longdouble)
14
15 --functions--
16 def psi(x, n, a):
17     return np.sqrt(2/a) * np.sin(((n*np.pi)/a) * x)
18
19 def E_n(n):
20     return (n**2*np.pi**2*hbar**2)/(2*m*a**2)
21
22 #Plot
23 plt.figure(figsize=(10, 6))
24 for n in range(1, 5):
25     plt.plot(x, psi(x, n, a)/1e10, label=f' _ {n}(x)')
26
27 plt.xlabel("x")
28 plt.ylabel(" _n (x)")
29 plt.legend()
30 plt.grid(True)
31 plt.savefig("infinitePotential.png", dpi=300)

```

Program 3: Uendelig potensial

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 # Parametere
5 a = 1.0
6 x = np.linspace(0, a, 1000)
7
8 # Funksjon for sannsynlighetstetthet
9 def psi_squared(n, x, a, scale=0.6):
10     psi = np.sqrt(2/a) * np.sin(n * np.pi * x / a)
11     return scale * psi**2 # reduser høyden
12
13 # Plot
14 plt.figure(figsize=(6, 6))
15
16 for n in range(1, 4):
17     offset = (n - 1) * 1.8 # større mellomrom mellom nivåene
18     y = psi_squared(n, x, a)
19     plt.plot(x, y + offset, color='green', linewidth=2)
20     plt.text(-0.17, offset + 0.1, f" $n_{\square}=\square{n}$ ", fontsize=12)
21     plt.hlines(offset, 0, a, color='black', linestyle='dashed',
22               linewidth=0.8)
23
24 # Veggene til boksen
25 plt.vlines(0, 0, 4.8, color='gray', linewidth=6)
26 plt.vlines(a, 0, 4.8, color='gray', linewidth=6)
27
28 # Akser og merking
29 #plt.xlabel("x")
30 #plt.ylabel(r" $|\psi(x)|^2$ ", loc='top', rotation=0, labelpad=15)
31 plt.text(-0.1, 5.0, r" $|\psi(x)|^2$ ", fontsize=13, color='black')
32 #plt.title("Sannsynlighetstetthet for partikkel i uendelig potensialbrö
33         nn")
34 plt.xlim(-0.1, a + 0.1)
35 plt.ylim(-0.2, 5.2)
36 plt.xticks([0, a], ["0", "1.0e-10"])
37 plt.yticks([])
38 plt.grid(False)
39
40 for spine in plt.gca().spines.values():
41     spine.set_visible(False)
42
43 plt.savefig("probabilityTimeless.png", dpi=300)

```

Program 4: Uendelig potensial sannsynelighet

```

1 from scipy import constants
2 import numpy as np
3 import matplotlib.pyplot as plt
4
5 # Constants
6 hbar = constants.hbar
7 m = constants.m_e           #masse
8 a = 1e-10                   #boksens lengde
9 N = 1000
10
11 T_rev = 4 * m * a**2 / (np.pi * hbar)
12
13 # Calculations
14
15 #--coordinates--
16 x = np.linspace(0, a, 1000, dtype=np.float64)
17 timestamps = np.linspace(0, 1e-16, 4)
18 timestamps = np.append(timestamps, T_rev - 1e-21)
19 #--functions--
20 def psi(x, t, a, N):
21     sum = np.zeros_like(x, dtype=complex)
22     for n in range(1, N + 1):
23         c_n = np.sqrt(6)/(n*np.pi)
24         spatial = np.sqrt(2/a)*np.sin((n*np.pi*x)/a)
25         temporal = np.exp(-1j * (n**2*np.pi**2*hbar)/(2*m*a**2)*t)
26         sum += c_n * spatial * temporal
27     return sum
28
29 #Plot
30 plt.figure(figsize=(10, 6))
31 n = 0
32 for t in timestamps:
33     plt.plot(x, np.abs(psi(x, t, a, N))**2, label=f'| - {n}(x,{np.trunc(
34         t*1e18)/1e18})| ')
35     n += 1
36 plt.xlabel("x")
37 plt.ylabel("| (x,t)| ")
38 plt.legend()
39 plt.grid(True)
40 plt.savefig("probabilityWithTime.png", dpi=300)

```

Program 5: Tidsavhengig bølgefunksjon