



Kandidatavhandling
Fysik

NUMERISK LÖSNING AV
SCHRÖDINGEREKVATIONEN I EN DIMENSION

Andreas Molander

20.4.2018

Handledare: Tommy Ahlgren
Granskare: Tommy Ahlgren

HELSINGFORS UNIVERSITET
INSTITUTIONEN FÖR FYSIK

Gustaf Hällströms gata 2
00560 Helsingfors universitet

Abstrakt

I denna kandidatavhandling presenteras två numeriska metoder med vilka man kan lösa partiella differentialekvationer: Eulers stegmetod och Crank-Nicolsons metod. Crank-Nicolsons metod används för att lösa Schrödingerekvationen i en dimension. Även en analytisk lösning av Schrödingerekvationen för *partikeln i lådan* presenteras. Lösningarna demonstrerar dynamiken hos vågpaket, energins kvantisering och tunneleffekten. Simuleringarna är skrivna i Python och programmen hittas på GitHub: <https://github.com/andreamolander/schrodinger>.

Innehåll

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Inledning | 1 |
| 2 | Partiella differentialekvationer | 1 |
| 3 | Schrödingerekvationen | 1 |
| 4 | Lösningsmetoder | 2 |
| 4.1 | Analytisk lösning | 2 |
| 4.2 | Finita differensmetoder | 2 |
| 4.2.1 | Eulers stegmetod | 4 |
| 4.2.2 | Crank-Nicolsons metod | 4 |
| 5 | Lösningsmetodernas tillämpning på Schrödingerekvationen | 5 |
| 5.1 | Analytisk lösning | 5 |
| 5.2 | Eulers stegmetod | 7 |
| 5.3 | Crank-Nicolsons metod | 8 |
| 6 | Simuleringar med Crank-Nicolsons metod | 8 |
| 6.1 | Vågfunktionen | 9 |
| 6.2 | Harmonisk potential | 10 |
| 6.3 | Tunneleffekten | 10 |
| 6.4 | Potentialgrop | 11 |
| 7 | Sammanfattning | 13 |

1 Inledning

All materia uppvisar våg-partikeldualitet. Dynamiken för en partikel kan beskrivas med en vågfunktion vars beteende bestäms av Schrödingerekvationen. Schrödingerekvationen är en partiell differentialekvation som likt många andra av denna typ av ekvationer kan lösas exakt i endast ett fåtal enklare fall. En sådan situation kallas *partikeln i lådan*, vars analytiska lösning visas här. På grund av de analytiska lösningarnas fåtal är det även viktigt att känna till andra metoder med vilka man kan lösa denna typ av ekvationer med tillräcklig noggrannhet.

Här presenteras två metoder med vilka man numeriskt kan lösa partiella differentialekvationer. En av metoderna, Crank-Nicolsons metod, tillämpas på Schrödingerekvationen för att demonstrera några kvantmekaniska effekter av materiens vågnatur.

2 Partiella differentialekvationer

En partiell differentialekvation (PDE) relaterar en funktion till förändringar i dess värde med avseende på minst två oberoende variabler [6]. Partiella differentialekvationer används i så gott som alla fysikens delområden för att beskriva situationer och problem. De förekommer också inom andra områden, t.ex. kemi, biologi och ekonomi. Inom fysiken stöter man på en specifik typ av PDE speciellt ofta: partiella differentialekvationer av andra graden i två dimensioner med formen

$$a \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + d \frac{\partial F}{\partial x} + e \frac{\partial F}{\partial y} + fF + g = 0, \quad (1)$$

där F är den beskrivna funktionen, x och y de två dimensionerna och a , b , c , d , e , f , g kan vara konstanter eller funktioner av x , y eller F . Den vanliga diffusionsekvationen

$$\frac{\partial F}{\partial t} = D \frac{\partial^2 F}{\partial x^2}, \quad D = \text{konstant}, \quad (2)$$

och Schrödingerekvationen är av denna typ. Mer specifikt är de dessutom paraboliska, som är fallet för ekvation (1) då $b^2 - 4ac = 0$ [6]. Analytiska lösningar till dessa ekvationer finns endast i ett fåtal enklare fall, därför behövs metoder för att på andra sätt kunna beskriva systemet i fråga [5].

Numeriska metoder är metoder som uppskattar funktionens värde i systemet baserat på begynnelsevärden och eventuella gränsvärden. En viss typ av numerisk metod lämpar sig ofta bäst för en viss typ av differentialekvation [2].

3 Schrödingerekvationen

Våg-partikeldualiteten innebär att materien beter sig både som klassiska partiklar och så som vågor [4]. I praktiken är vågegenskaperna hos materia endast

observerbara i små system, exempelvis hos elementarpartiklar.

Ett kvanttilstånd, t.ex. för en elementarpartikel, kan beskrivas med en vågfunktion Ψ . Schrödingerekvationen, namngiven efter den österrikiske fysikern Erwin Schrödinger (1887-1961), bestämmer hur denna vågfunktion beter sig med tiden:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi, \quad (3)$$

där \hat{H} är Hamiltonoperatoren

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V, \quad (4)$$

och V är en eventuell potential som växelverkar med partikeln.

För ett system beskrivet av Schrödingerekvationen kan superpositionsprincipen tillämpas vilket innebär att en linjärkombination av lösningar till Schrödinger-ekvationen också är en lösning till Schrödingerekvationen, dessutom kan våg-funktionen interferera med sig själv. Storheten $\Psi^* \Psi$ ska tolkas som en sannolikhetsfördelning mellan olika exakta tillstånd. Det gäller att

$$\int_V \Psi^* \Psi dV = 1, \quad (5)$$

eftersom det beskrivna systemet med säkerhet befinner sig i något tillstånd, t.ex. om Ψ är vågfunktionen för en partikel så måste partikeln finnas någonstans i volymen V .

Schrödingerekvationen beskriver analogt till Newtons rörelseekvationer dynamiken hos ett kvanttilstånd med massan m och som påverkas av potentialen V , men till skillnad från klassisk mekanik bestämmer den endast sannolikheten för verkliga event. [4]

4 Lösningsmetoder

4.1 Analytisk lösning

I vissa situationer, ofta förenklade system som inte påträffas i verkligheten men som kan användas som approximationer av verkligheten, finns det analytiska lösningar till Schrödingerekvationen. De analytiska lösningsmetoderna skiljer sig naturligtvis från varandra beroende på situation. I kapitel (5.1) presenteras en analytisk lösning av Schrödingerekvationen för *partikeln i lådan* i en dimension.

4.2 Finita differensmetoder

Den vanligaste metoden för att numeriskt lösa partiella differentialekvationer kallas finita elementmetoden (FEM) [6]. Metoden diskretiserar det av ekvationen beskrivna systemet i ett ändligt antal element. Finita differensmetoden (FDM) kan ses som en typ av FEM och använder differensen mellan systemets uppdelningar för att numeriskt lösa partiella differentialekvationer. [6]

Här behandlas endast system med en rumsdimension. Dimensionens område av intresse delas upp i N lika stora element, där elementens storlek är Δx då x är dimensionens axel. Här betecknas $x_i \equiv i\Delta x$.

Om en funktion f och dess derivator är envärda, ändliga och kontinuerliga funktioner av x så kan följande approximeringar göras för dess två första derivator: med framåtdifferens

$$\left(\frac{df}{dx}\right)_{x=x_i} \simeq \frac{1}{\Delta x} (f(x_i + \Delta x) - f(x_i)), \quad (6)$$

och på motsvarande sätt med bakåtdifferens

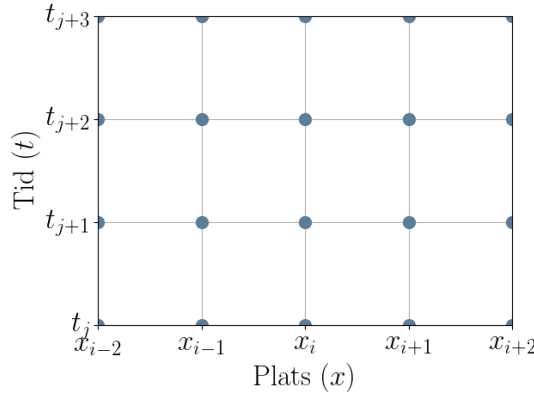
$$\left(\frac{df}{dx}\right)_{x=x_i} \simeq \frac{1}{\Delta x} (f(x_i) - f(x_i - \Delta x)). \quad (7)$$

Dessa två approximationer har ett fel av storleksordningen $O(\Delta x)$. Med central-differensapproximering får man

$$\left(\frac{d^2f}{dx^2}\right)_{x=x_i} \simeq \frac{1}{(\Delta x)^2} (f(x_i + \Delta x) - 2f(x_i) + f(x_i - \Delta x)), \quad (8)$$

där felet är av storleksordningen $O(\Delta x^2)$ [6].

Man kan använda ett gitter av beräkningsnoder för att visualisera lösningsmetoderna, se figur (1). Noderna i gittrets x -led representerar de finita elementen i systemets rumsdimension. Raderna av noder i t -led representerar samma noder vid olika diskretiserade tidpunkter.



Figur 1: Gitter av beräkningsnoder.

En explicit FDM ger nodernas värden vid tidpunkten t_j mer eller mindre direkt av nodernas värden vid tidpunkten t_{j-1} . Med en implicit metod så behöver man lösa ett ekvationssystem med ett antal simultana ekvationer för att erhålla de nya värdena. Generellt är implicita metoder exaktare än explicita metoder som därför kräver ett mindre tidssteg Δt och blir mer resurskrävande än implicita metoder. [6]

Nedan beskrivs två typer av FDM, Eulers stegmetod, som är explicit, och Crank-Nicolsons metod som implicit. Metoderna används ofta för att lösa paraboliska PDE med samma form som diffusionsekvationen (ekvation (2)), denna ekvation används för att demonstrera metoderna. Nedan gäller $f = f(x, t)$ och $f(x_i, t_j)$ betecknas $f_{i,j}$.

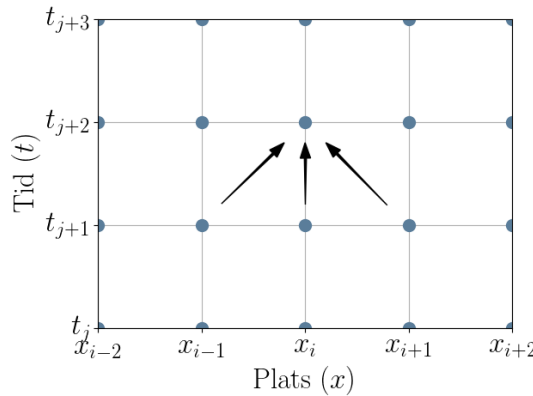
4.2.1 Eulers stegmetod

Eulers stegmetod, namngiven efter matematikern Leonhard Euler (1707-1783) som använde FDM redan på 1760-talet [1], går ut på att man gör en framåt-differensapproximering för en funktion och därifrån löser ut funktionens värde vid nästa tidssteg [6].

För att exemplifiera ersätts derivatorna i ekvation (2) med approximeringarna från ekvation (6) och (8) och man erhåller

$$\frac{f_{i,j+1} - f_{i,j}}{\Delta t} \simeq D \frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{(\Delta x)^2}, \quad (9)$$

varifrån $f_{i,j+1}$ kan beräknas. Metoden är därmed explicit. Beräkningsnodernas förhållanden ses i figur (1). De inkluderade beräkningsnoderna för en beräkning kallas ibland beräkningsmolekyl [2].



Figur 2: Beräkningsmolekyl för Eulers stegmetod. Värdet för $f_{i,j+2}$ fås från $f_{i-1,j+1}$, $f_{i,j+1}$ och $f_{i+1,j+1}$.

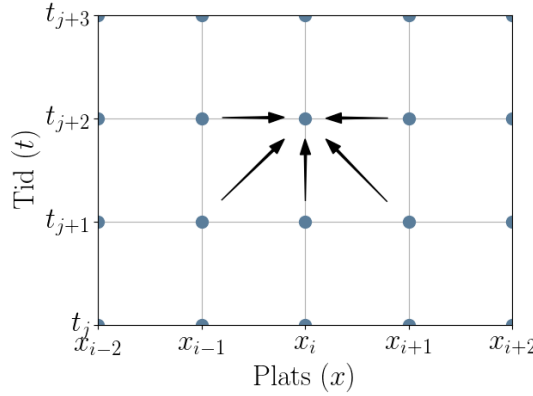
Eulers stegmetod ger användbara lösningar endast med extremt små tidssteg, vilket gör den ineffektiv. Metoden används i praktiken aldrig mera utan har blivit ersatt av metoder som exempelvis den betydligt effektivare Crank-Nicolson metoden [2].

4.2.2 Crank-Nicolsons metod

En annan metod för numerisk lösning av denna typ av ekvationer, numera kallad Crank-Nicolsons metod (CN), föreslogs år 1947 av fysikern John Crank (1916-2006) och matematikern Phyllis Nicolson (1917-1968). Till skillnad från Eulers

stegmetod görs i CN-metoden ännu en bakåtdifferensapproximation (ekvation (7)) från $f_{i,j+1}$ om framåtdifferensapproximationen (ekvation (6)) gjordes från $f_{i,j}$. Därefter adderas dessa resultat [6]. Exemplekvationen (ekvation (2)) blir

$$\frac{f_{i,j+1} - f_{i,j}}{\Delta t} \simeq D \frac{1}{2} \left(\frac{f_{i+1,j+1} - 2f_{i,j+1} + f_{i-1,j+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} \right). \quad (10)$$



Figur 3: Beräkningsmolekyl för Crank-Nicolsons metod. Värdet för $f_{i,j+2}$ fås från $f_{i-1,j+1}$, $f_{i,j+1}$, $f_{i+1,j+1}$ samt de okända värdena $f_{i-1,j+2}$ och $f_{i+1,j+2}$.

För varje tidssteg j får man ett ekvationssystem med N linjära ekvationer, vilket gör att metoden är implicit. Ekvationssystemet är tridiagonalt av formen $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{d}$ och löses enkelt med den tridiagonala matrisalgoritmen (även kallad Thomas algoritmen efter Llewellyn Thomas) [1]. Crank-Nicolsons metod är alltid stabil men beroende på val av Δx och Δt kan det uppstå oönskade oscillationer i lösningarna [6].

5 Lösningsmetodernas tillämpning på Schrödingerekvationen

I detta kapitel beskrivs hur Schrödingerekvationen löses i en dimension med hjälp av metoderna som beskrevs i kapitel (4).

5.1 Analytisk lösning

Partikeln i lådan är ett enkelt exempel på ett kvantmekaniskt system som ofta används som ett inledande problem där Schrödingerekvationen kan lösas exakt och för att demonstrera kvantifieringen av energi.

Här behandlas det endimensionella fallet där en partikel befinner sig mellan två oändligt höga potentialbarriärer, därav analogin till lådan. Lådans längd är L och systemets potential är

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < L/2 \\ \infty, & |x| \geq L/2 \end{cases}. \quad (11)$$

Partikeln kan ej befinna sig vid en plats där potentialen är oändlig och man vet därmed att $\Psi = 0$ då $|x| \geq L/2$. Man behöver alltså endast lösa Schrödingerekvationen för partikelns vågfunktion inuti lådan

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t). \quad (12)$$

Antagandet om att man kan dela upp vågfunktionen i en platsberoende och en tidsberoende del, $\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$, gör att man enkelt kan lösa ut den tidsberoende delen av vågfunktionen $\phi(t)$ ur Schrödingerekvationen som

$$\phi(t) = e^{-it\frac{E}{\hbar}}, \quad (13)$$

där E är en konstant som här ska tolkas som partikelns totalenergi [3]. Kvar har man den tidsberoende Schrödingerekvationen

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + E\psi(x) = 0, \quad (14)$$

vars lösningar är av formen

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (15)$$

där $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ [4]. Man har nu vågfunktionen för en fri partikel

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t) = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-it\frac{E}{\hbar}}. \quad (16)$$

Partikeln i lådan är inte helt fri. Vågfunktionen måste vara kontinuerlig vid lådans kanter, dvs när $|x| = L/2$, då gäller

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = 0. \quad (17)$$

Detta ger kraven

$$Ae^{-ikL/2} + Be^{ikL/2} = 0, \quad (18)$$

$$Ae^{ikL/2} + Be^{-ikL/2} = 0. \quad (19)$$

Från dessa krav kan man lösa ut $k = n\pi/L$, där n är ett heltal. Partikelns möjliga energier är därmed kvantiserade enligt

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2}. \quad (20)$$

Konstanterna A och B kan nu bestämmas och efter normalisering (ekvation (5)) har man vågfunktionen för partikeln i lådan

$$\Psi(x, t) = \phi(t)\psi(x) = e^{-it\frac{E}{\hbar}} \sqrt{\frac{2}{L}} \begin{cases} \cos(n\pi x/L) & , n = 1, 3, 5, \dots \\ \sin(n\pi x/L) & , n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (21)$$

[3]

5.2 Eulers stegmetod

Schrödingerekvationen i en dimension (x) är

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H} \Psi(x, t), \quad (22)$$

där Hamiltonoperatören är

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (23)$$

Platsderivatan i \hat{H} ersätts med centraldifferensapproximeringen gjord i ekvation (8) och Schrödingerekvationen i beräkningsnod (i, j) blir

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{i,j} \simeq -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi_{i-1,j} - 2\Psi_{i,j} + \Psi_{i+1,j}}{(\Delta x)^2} + V_i \Psi_{i,j}. \quad (24)$$

Då $\Psi_j \equiv (\Psi_{1,j}, \Psi_{2,j}, \dots, \Psi_{N,j})^T$ får vi ekvationssystemet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_j \simeq H \Psi_j, \quad (25)$$

där H är den tridiagonella matrisen

$$H = \begin{pmatrix} H_{1,1} & H_{1,2} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ H_{2,1} & H_{2,2} & H_{2,3} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & H_{3,2} & H_{3,3} & H_{3,4} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & H_{N-2,N-3} & H_{N-2,N-2} & H_{N-2,N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & H_{N-1,N-2} & H_{N-1,N-1} & H_{N-1,N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & H_{N,N-1} & H_{N,N} \end{pmatrix}$$

med elementen

$$H_{n,n} = \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + V_n \quad \text{och} \quad H_{n,n+1} = H_{n+1,n} = -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}. \quad (26)$$

De resterande elementen är 0. Ersätter man tidsderivatan med framåtdifferensapproximeringen (ekvation (6)) så kan man lösa ut vågfunktionens värde i nästa tidssteg som

$$\Psi_{j+1} \simeq \Psi_j \left(1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} H \right). \quad (27)$$

5.3 Crank-Nicolsons metod

Med Crank-Nicolsons metod ersätter man på samma sätt som i Eulers stegmetod platsderivatan i Hamiltonoperatoren med centraldifferensapproximeringen (ekvation (8)) och erhåller samma ekvationssystem

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_j \simeq H \Psi_j. \quad (28)$$

Härifrån görs en framåtdifferensapproximering (ekvation (6)) med tidssteget $\Delta t/2$. Schrödingerekvationen blir

$$i\hbar \frac{\Psi_{j+1/2} - \Psi_j}{\Delta t/2} \simeq H \Psi_j, \quad (29)$$

och man får

$$\Psi_{j+1/2} \simeq \Psi_j \left(1 - \frac{i\Delta t}{2\hbar} H \right). \quad (30)$$

På samma sätt med en bakåtdifferensapproximering (ekvation (7)) får man

$$\Psi_{j+1/2} \simeq \Psi_{j+1} \left(1 + \frac{i\Delta t}{2\hbar} H \right). \quad (31)$$

Man kan nu konstruera ekvationssystemet

$$\Psi_j \left(1 - \frac{i\Delta t}{2\hbar} H \right) = \Psi_{j+1} \left(1 + \frac{i\Delta t}{2\hbar} H \right). \quad (32)$$

Det vänstra ledet i ekvation (32) är en känd vektor med längden N , ekvationssystemet är alltså av formen

$$\mathbf{A} \Psi_{j+1} = \mathbf{d}, \quad (33)$$

ur vilket man t.ex. med den tridiagonella matrisalgoritmen kan lösa Ψ_{j+1} .

6 Simuleringar med Crank-Nicolsons metod

Här visas hur ett vågpaket beter sig i några olika potentialer när Schrödingerekvationen simuleras med CN-metoden. I alla simuleringar har följande parametrar använts: $m = 1$, $\hbar = 1$, $\Delta x = 0,04$; $\Delta t = 0,05$. x -dimensionen är uppdelad från -10 till 10 i 500 delar. I kapitel (6.1) motiveras hur det simulerade vågpaketets initialvärden har valts.

Lösningarna beräknades i Python. Simuleringsprogrammen hittas på GitHub: <https://github.com/andreamolander/schrodinger>.

6.1 Vågfunktionen

Vågfunktionen för en fri partikel har i kapitel (5.1) visats vara

$$\Psi(x, t) = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-it\frac{E}{\hbar}}. \quad (34)$$

Den här vågfunktionen ger ingen information om partikelns position. Sannolikheten är lika stor att hitta den var som helst på x -axeln. Andelen av vågfunktionen som beskriver en partikel som rör sig i positiv riktning längs med x -axeln ges av konstanten A och andelen av vågen som fortskrider i negativ riktning ges av konstanten B [4]. Eftersom man fritt kan välja ursprungsläget i simuleringarna så kan t.ex. B -termen tas bort och man får vågfunktionen

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}, \quad (35)$$

där vinkelfrekvensen ω enligt de Broglies relationer för materievågor är $\omega = E/\hbar$.

För att nu konstruera ett vågpaket med intressant information om partikelns läge adderas ett oändligt antal vågfunktioner med olika vågtal k som skapar en ny vågfunktion enligt

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k)e^{i(kx - \omega t)} dk. \quad [4] \quad (36)$$

Funktionen $A(k)$ ser nu till att sannolikheten för att hitta partikeln inte är densamma överallt. $A(k)$ kan bestämmas genom att beräkna Fouriertransformen av $\Psi(x, t)$ vid tidpunkten $t = 0$,

$$A(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0)e^{-ikx} dx. \quad (37)$$

För att beräkna $A(k)$ måste ett uttryck för $\Psi(x, 0)$ väljas och även här kan det väljas fritt, förutsatt att den valda funktionen kan normaliseras. Man har valt

$$\Psi(x, 0) = Ce^{ik_0x - (x - x_0)^2/(2\sigma)^2}, \quad (38)$$

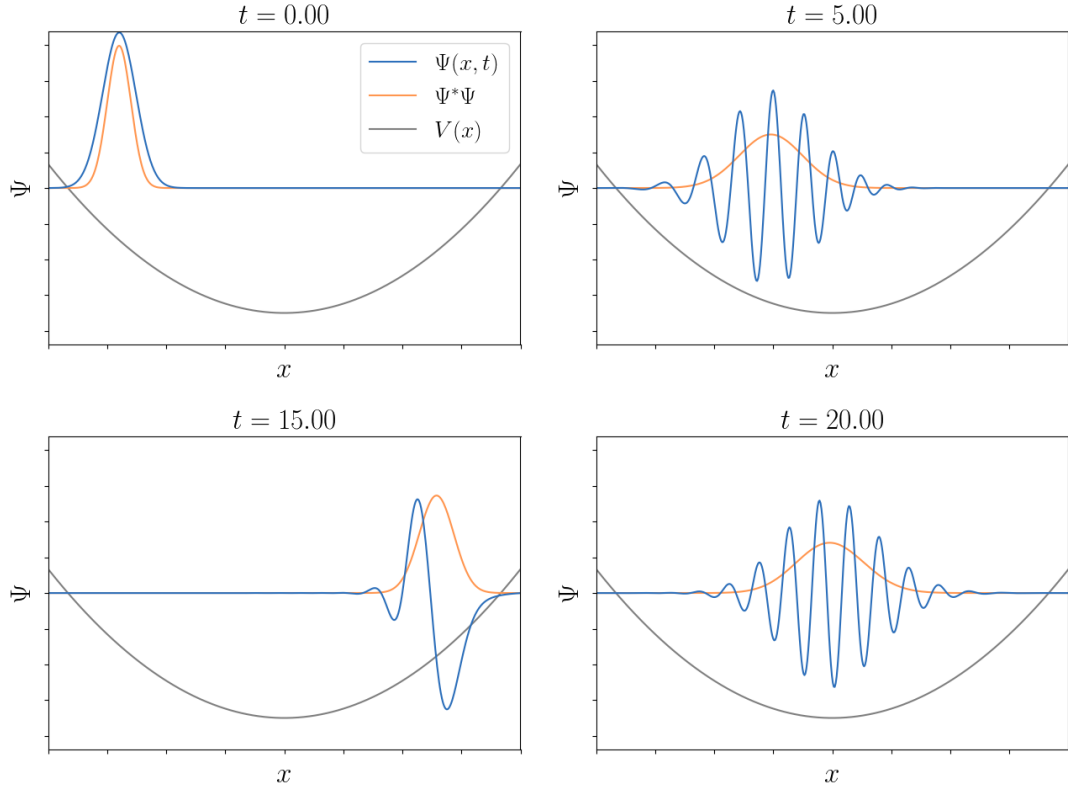
där k_0 är vågtalet och C är normaliseringskonstanten. Denna vågfunktion har en sannolikhetsfördelning $\Psi^*\Psi$ som är normalfördelad runt x_0 med standardavvikelsen σ , och ger därmed en visuellt tilltalande kurva som lämpar sig bra för simuleringar där man främst är intresserad av enkelt åskådliggöra vågfunktionens allmänna beteende.

Eftersom man endast behöver initialvärdet av en rimlig vågfunktion för att göra simuleringarna, kan man nöja sig med att normalisera Ψ i ekvation (38). Funktionens parametrar kan sedan justeras för att göra en fin simulering. Efter normalisering har man

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{ik_0x - (x - x_0)^2/(2\sigma)^2}. \quad (39)$$

6.2 Harmonisk potential

I figur (4) ses hur ett vågpaket fortskrider i en harmonisk potential $V = \frac{1}{2}kx^2$, där k har valts till 0,5. Den utritade potentialen har justerats med en faktor 1/30 och förskjutits med $-0,7$ för att få en tydligare bild. Vågpaketets initialvärden har valts med parametrarna $\sigma = 0,5$; $k_0 = 0$ och $x_0 = -7$.

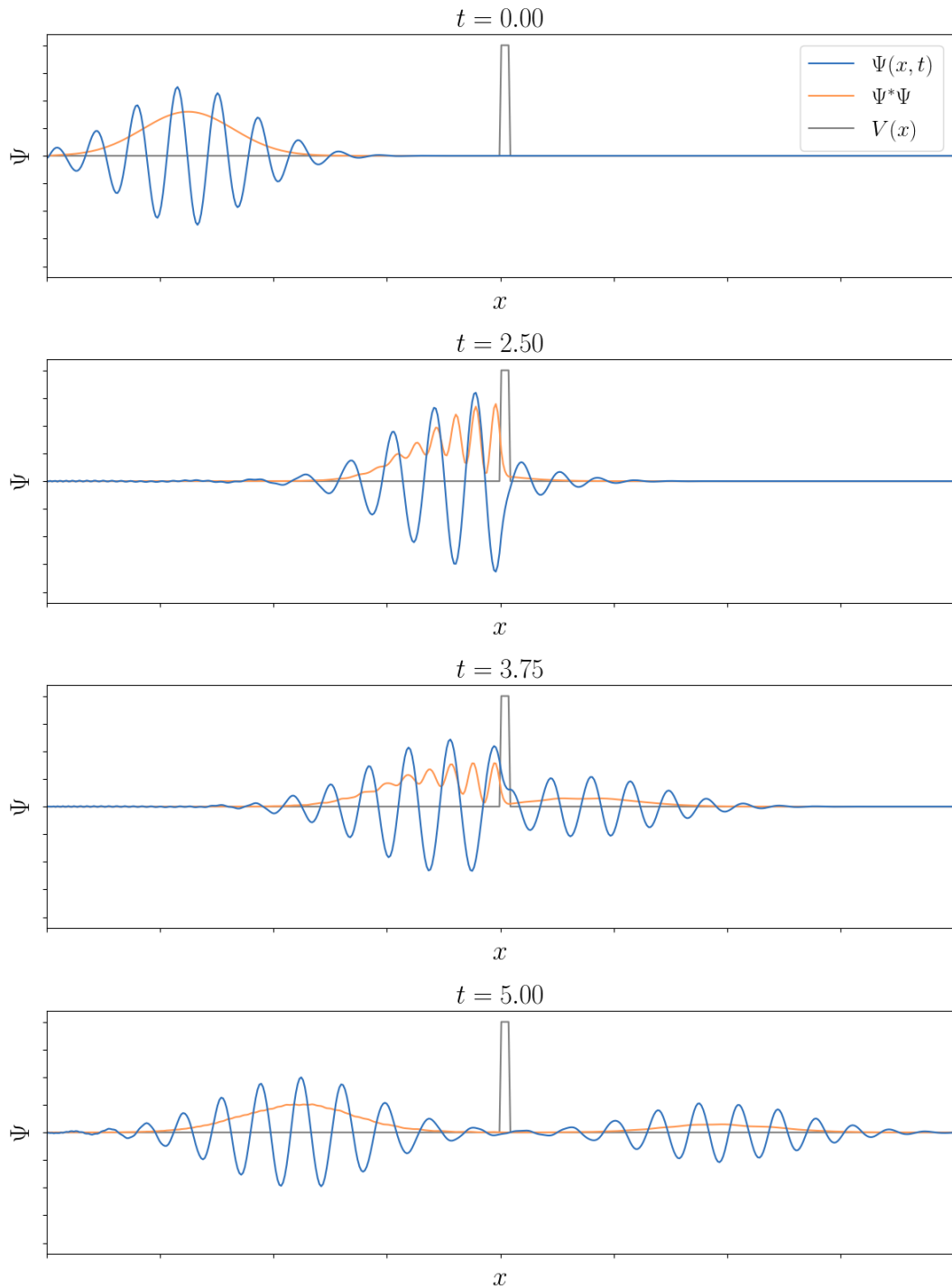


Figur 4: Ett vågpaket i en harmonisk potential.

6.3 Tunneleffekten

I figur (5) ses ett vågpaket som tunnlar genom en potentialbarriär. I ett klassiskt system skulle partikeln ha vänt vid potentialbarriären, förutsatt att barriären är hög nog. Här ses från hur $\Psi^*\Psi$ är fördelad att det finns en liten sannolikhet att partikeln åkte rakt igenom barriären. Detta fenomen kallas tunneleffekten och är en direkt konsekvens av Schrödingerekvationen. En analogi till tunneleffekten är att en fotboll som sparkas med liten kraft mot en stor kulle, kommer att rulla över kullen med en liten sannolikhet, när det klassiskt sett är omöjligt för bollen att slippa upp för kullen och ner på andra sidan. Tunneleffekten är orsaken till α -sönderfall [3].

Vågpaketets initialvärden var $\sigma = 1$, $k_0 = 7$ och $x_0 = -7$. Potentialbarriären är 50 potentialenheter hög men har skalats ner till 1 potentialenhet i bilden, dess bredd är 1% av x -axelns längd.

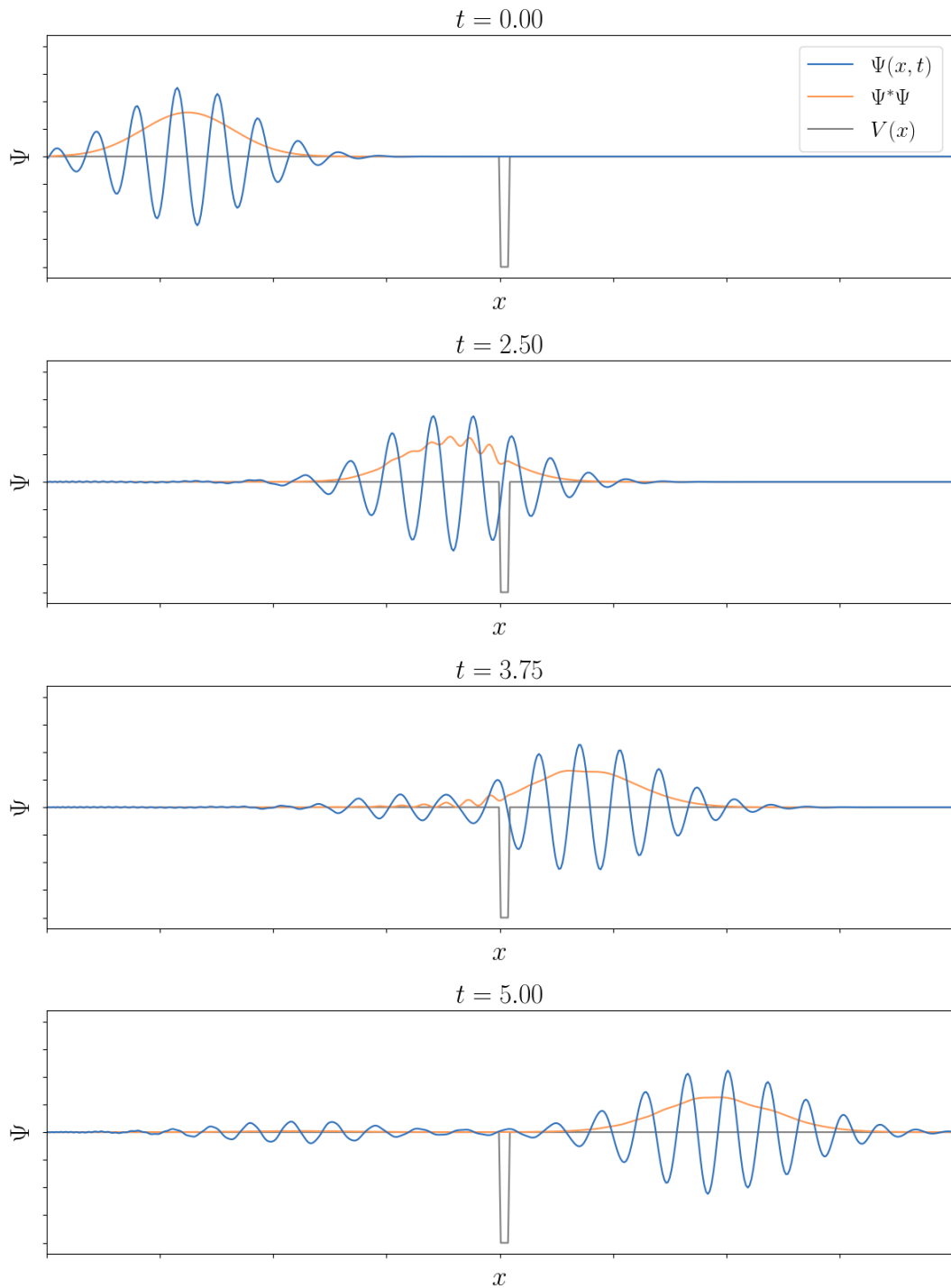


Figur 5: Ett vågpaket som tunnlar genom en potentialbarriär.

6.4 Potentialgrop

Ett annat kvantmekaniskt fenomen ses i figur (6). Här demonstreras sannolikheten att partikeln studsar tillbaka från en potentialgrop. Denna simulering är likadan som för tunneleffekten men med en potentialbarriär med värdet -10

potentialenheter. Även detta fenomen är omöjligt i den klassiska mekaniken.



Figur 6: Ett vågpaket som reflekteras från en potentialgrop.

7 Sammanfattning

För numeriska lösningar av partiella differentialekvationer används Eulers stegmetod i praktiken inte mer då noggrannare och effektivare metoder så som Crank-Nicolsons metod finns tillgängliga. CN-metoden är stabil och relativt snabb.

Genom att simulera de vågpaket vars beteende bestäms av Schrödingerekvationen kan man visualisera fenomen som klassiskt sett är omöjliga, exempelvis tunneeffekten och att ett vågpaket, dvs en partikel, reflekteras tillbaka från en potentialgrop. Dessa fenomen, samt energins kvantisering som visades i lösningen av *partikeln i lådan*, påträffas endast i kvantmekaniken.

Referenser

- [1] William F. Ames. *Numerical methods for partial differential equations*. Academic Press, New York, 2 edition, 1977.
- [2] Joel H. Ferziger. *Numerical methods for engineering application*. Wiley, New York, 1981.
- [3] Stephen Gasiorowicz. *Quantum physics*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1974.
- [4] Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics*. Wiley, New York, 3 edition, 1998.
- [5] Alfio Quarteroni. *Numerical Models for Differential Problems*. Springer, Milan, New York, 2 edition, 2014.
- [6] G.D. Smith. *Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods*. Clarendon, Oxford, 3 edition, 1985.