Transmissie van een QM gaussisch golfpakketje door een rechthoekige potentiaal

Verslag eindopdracht Fortran/Numerieke natuurkunde

December 1991 / Januari 1992

Martijn Nuijt

Inleverdatum: 24 januari 1992

korte samenvatting

In dit experiment wordt met behulp van een in FORTRAN geprogrammeerd model de transmissie bestudeerd van een gaussisch golfpakketje door een rechthoekige potentiaalberg of -put. Het blijkt dat het goed mogelijk is de transmissiecoëfficient als funktie van de hoogte van de berg, de breedte van de berg en de breedte van het golfpakketje te bestuderen. Een belangrijk resultaat was dat er voor bepaalde waarden van de breedte en de hoogte van de potentiaalberg bij een zekere energie resonanties optreden in de transmissiecoëfficient; hiervoor is een verklaring gevonden.

Inleiding

In dit experiment wordt met behulp van de computer het gedrag van quantummechanische transmissie en reflectie aan potentialen bestudeerd. Het experiment beperkt zich tot gaussische golfpakketjes, rechthoekige potentialen en tot één dimensie. Het golfpakketje heeft een massa m, een energie E, een breedte deltax (lees: delta x) en een beginpositie x_i. De golffunktie Psi is dus geheel bekend op tijdstip t=0.
De potentiaal is overal 0 behalve in het gebied waarvoor geldt $|x| < a$. Daar heeft de potentiaal een waarde V_i. Dus:

$$\begin{cases} V(x) = 0 & x<-a \vee x>a \\ V(x) = V_i & -a<x<a \end{cases}$$

De volgende problemen zullen aan de orde komen:

1. Hoe ziet de golffunktie Psi en, interessanter, $|Psi|^2$ eruit voor t>0, dus vóór, tijdens en na de reflectie en transmissie door de potentiaalberg (of put)?
2. Hoe kunnen de waarden voor de reflectie- en transmissiecoëfficient berekend worden?
3. Hoe hangt de transmissiecoëfficient af van de hoogte van de potentiaalberg, de breedte van de potentiaalberg en de breedte van het pakketje.

Theorie

Hieronder wordt de benodigde theorie kort samengevat; een meer uitgebreide behandeling van deze theorie is o.a. te vinden in Merzbacher en in Liboff (zie Literatuur).
De Schrödingervergelijking in één dimensie luidt:

$$i\hbar \; d/dt(Psi(x,t)) = (-\hbar^2/(2m) \; d^2/dx^2 + V(x)) \; Psi(x,t) \qquad (1)$$

Door te veronderstellen dat Psi(x,t) geschreven kan worden als het produkt van een plaatsafhankelijke funktie en een tijdsafhankelijke funktie:

$$Psi(x,t) = Psi(x) \cdot f(t) \tag{2}$$

kan (1) worden gescheiden in:

$$(-\hbar^2/(2m)\ d^2/dx^2 + V(x)\ )\ Psi(x) = E \cdot Psi(x) \tag{3}$$

en $\quad i\hbar\ df(t)/dt = E \cdot f(t) \qquad (4)$

Voor (4) luidt de oplossing:

$$f(t) = EXP(-iEt/\hbar) \tag{5}$$

Laat nu V(x) de potentiaal zijn die overal 0 is behalve in het gebied $-a<x<a$. in dit gebied geldt dat $V(x)=V_0$. Vervolgens wordt Psi(x) gesplitst in drie delen: Psi_I, Psi_{II} en Psi_{III} voor respektievelijk de gebieden $x<-a$, $-a<x<a$ en $x>a$. De oplossing van (3) is dan eenvoudig te vinden en luidt:

$$\begin{aligned} Psi_I\ (x) &= A \cdot EXP(ik1x) + B \cdot EXP(-ik1x) \\ Psi_{II}\ (x) &= C \cdot EXP(ik2x) + D \cdot EXP(-ik2x) \\ Psi_{III}\ (x) &= F \cdot EXP(ik1x) + G \cdot EXP(-ik1x) \end{aligned} \tag{6}$$

met $\hbar k1=\sqrt{(2mE)}$ en $\hbar k2=\sqrt{(2m(E-V_0))}$

Als $V_0>E$ wordt de wortel negatief en zal k2 een complex getal worden.

In het geval van een golfpakketje dat van links intreedt zal de factor A samenhangen met het intredende pakketje, de factor B met de reflectie en de factor F met de transmissie. De factoren C en D hangen samen met het verloop binnen de potiaalberg/put. De factor G zal in dat geval dus gelijk zijn aan nul: er is geen deel van het pakketje dat in gebied III van rechts naar links loopt. De overgebleven vijf onbekenden (A,B,C,D,F) kunnen nu gevonden worden door aansluitcondities op te leggen: de funktie in z'n geheel moet overal continu differentieerbaar zijn, ook in de punten x=a en x=-a waar de drie gebieden aansluiten. In deze punten moeten de linker en rechterlimiet van de funktie en de eerste afgeleide aan elkaar gelijk zijn. Dit leidt tot de volgende vergelijkingen:

$$\begin{aligned} Psi_I(-a) &= Psi_{II}(-a) \\ Psi_I'(-a) &= Psi_{II}'(-a) \\ Psi_{II}(a) &= Psi_{III}(a) \\ Psi_{II}'(a) &= Psi_{III}'(a) \end{aligned} \tag{7}$$

Invullen van de eerder gevonden algemene oplossingen voor Psi_I, Psi_{II} en Psi_{III} levert vier vergelijkingen met vijf onbekenden (A,B,C,D,F). Dit betekent dat B,C,D en F zijn uit te drukken in A. In het vervolg zal A=1 gekozen worden. Voor het oplossen van de onbekenden en de resultaten wordt verwezen naar bijlage A.

De volgende stap is om de beginvoorwaarde, namelijk Psi(x,t=0), in te voeren. Voor Psi(x,t=0) wordt een gaussisch golfpakketje genomen dat geheel in gebied I ligt. Vervolgens moet Psi(x,t=0) ontwikkeld worden naar de eigenfunkties. Het spectrum van eigenfunkties is echter continu, dus zal dit een continue som worden, een integraal over de eigenfunkties dus:

$$Psi(x,t=0) = 1/\sqrt{(2\cdot\pi)} \int phi(k)\ EXP(ikx)\ dk \tag{8}$$

waarin $1/\sqrt{(2\cdot\pi)}$ een normeringsfactor is

In deze formule geeft phi(k) dus de amplitude aan met welke de bijdrage EXP(ikx) is vertegenwoordigd in Psi(x,t=0). Het blijkt dus dat Psi(x,t=0) en phi(k) elkaars Fourier getransformeerden zijn. Dus phi(k) kan gevonden worden door de Fouriergetransformeerde te nemen van Psi(x,t=0):

?

$$phi(k) = 1/\sqrt{(2\cdot\pi)} \int Psi(x,t=0)\ EXP(-ikx)\ dx \tag{9}$$

Als nu voor Psi(x,t=0) een gaussisch golfpakketje gecentreerd om x_r met breedte deltax en impuls $p_r = \hbar k_r$ wordt genomen, geldt:

$$Psi(x,t=0) = N\cdot EXP(-2(x-x_r)^2/deltax^2 + ik_r x) \tag{10}$$

waarin N een normeringsconstante is zodat de oppervlakte onder het pakketje gelijk is aan 1. Met formule (9) kan nu phi(k) bepaald worden; het blijkt dat geldt:

$$\text{phi}(k) = N' \cdot \text{EXP}(-\text{deltax}^2 \cdot (k-k_0)^2/8 + i(k-k_0)x_0) \qquad (11)$$

met N′ een normeringsconstante

Het blijkt dus dat phi(k) ook een gaussische vorm heeft. Ook is duidelijk dat naarmate de breedte van het golfpakketje in de x-ruimte, deltax, groter wordt, de breedte van de gauss-kromme in de k-ruimte kleiner wordt. Dit is in feite Heisenberg's onzekerheidsrelatie tussen plaats en impuls.
Hoe ziet Psi(x,t) er nu uit voor t>0? Hiervoor moet men bedenken dat de eigenfunkties veranderen in de tijd volgens de eerder gevonden f(t) (zie (5)). Om Psi(x,t) te vinden moet aan de componenten phi(k) in (8) dus nog een funktie f(t) worden toegevoegd die afhangt van de energie en dus van k ($E_k = \hbar^2 k1^2/(2m)$). Voor de funkties Psi_I, Psi_{II} en Psi_{III} als funktie van x en t vindt men dan dus:

$$\begin{array}{ll} x<-a & Psi_I(x,t) = N'' \int \text{phi}(k)\, \text{EXP}(-iE_k t/\hbar)\, (\text{EXP}(ik1x) + B \cdot \text{EXP}(-ik1x))\, dk \\ |x|<a & Psi_{II}(x,t) = N'' \int \text{phi}(k)\, \text{EXP}(-iE_k t/\hbar)\, (C \cdot \text{EXP}(ik2x) + D \cdot \text{EXP}(-ik2x)\, dk \\ x>a & Psi_{III}(x,t) = N'' \int \text{phi}(k)\, \text{EXP}(-iE_k t/\hbar)\, F \cdot \text{EXP}(ik1x)\, dk \end{array} \qquad (12)$$

met $\text{phi}(k) = \text{EXP}(-\text{deltax}^2 \cdot (k1-k_0)^2/8 + i(k1-k_0)x_0)$
en N″ een normeringsconstante

Methode

In het vervolg zullen natuurlijke eenheden worden gebruikt omdat de gerationaliseerde constante van Planck $\hbar$ dan gelijk is aan 1. Voor het terugrekenen van de gebruikte eenheden naar SI-eenheden van plaats, tijd en energie gelden dan de volgende relaties:

$x_{SI} = x_n$
$t_{SI} = t_n/c$ waarin c de lichtsnelheid is
$E_{SI} = \hbar c \cdot E_n$

Voor dit experiment zijn 4 FORTRAN-programma's geschreven: *gauss*, *vtrans*, *deltaxtrans* en *atrans*. Deze programma's zijn te vinden in bijlage B. Het eerste programma berekent en tekent Psi(x,t) van het gaussische golfpakketje bij het passeren van een potentiaalberg/put. De overige 3 programma's berekenen de transmissiecoëfficient T als funktie van respektievelijk de hoogte V0 van de potentiaalberg, de breedte deltax van het golfpakketje en de halve breedte a van de potentiaalberg/put. Deze 3 programma's hangen nauw samen met het programma *gauss*.

Berekening van $|Psi(x,t)|^2$

De methode die in het programma *gauss* wordt gebruikt valt in twee delen uiteen:

1. Het bepalen van de funktie phi(k).
2. Het kiezen van een positie x en een tijdstip t waarna $|Psi|^2$ bepaald kan worden. Deze stap kan herhaald worden voor verschillende posities zodat een grafiek verkregen wordt van $|Psi|^2$ als funktie x op tijdstip t.

Ad 1

De funktie phi(k) wordt in het programma vervangen door een array. Hiertoe wordt een koppelingsvariabele i gebruikt (in het vervolg en in het programma zal voor het complexe getal i de letter j worden gebruikt) zodat phi(i)=phi(k1(i)). k1 is dus ook een array. Ook k2 is een array en wordt gevuld zo dat $k2(i)=\sqrt{(k1(i)^2-2V_i)}$. De koppelingsvariabele i loopt van –n tot n. De lengte van het k–interval hangt echter niet af van n maar van dk: de variabele dk is het verschil tussen twee opeenvolgende k1–waarden (dk=(k1(n)–k1(–n))/(2n+1)). De variabele dk moet zo gekozen worden dat $|phi(n)|=|phi(-n)|=\varepsilon\approx0$: het mag niet zo zijn dat de gauss–kromme zich buiten het interval uitstrekt. Als gekozen wordt ε=EXP(–8) dan wordt met formule (11) als volgt een uitdrukking voor dk gevonden:

$$|phi(k)| = N'\cdot EXP(-deltax^2\cdot(n\cdot dk)^2/8) \doteq EXP\ (-8)$$

Verwaarloos N':

$$-deltax^2\cdot n^2\cdot dk^2/8 = -8$$

$$dk = 8/(deltax\cdot n) \qquad (13)$$

Voor k1 geldt dan: k1(i) = k10 + i·dk, met $k10=\sqrt{(2mE)}$ waarbij E de energie van het deeltje is; k10 (lees: k één,nul) is het centrale golfgetal.

BIJLAGE A BEPALING B, C, D en F

Door in vullen van ψ_I, ψ_{II} en ψ_{III} (zie (6)) in de aansluitcondities (7) ontstaan:

$$e^{-ik_1a} + B\, e^{ik_1a} = C e^{-ik_2a} + D\, e^{ik_2a} \qquad (a)$$
$$k_1\left[e^{-ik_1a} - B\, e^{ik_1a}\right] = k_2\left[C e^{-ik_2a} - D\, e^{ik_2a}\right] \qquad (b)$$
$$C\, e^{ik_2a} + D\, e^{-ik_2a} = F\, e^{ik_1a} \qquad (c)$$
$$k_2\left[C\, e^{ik_2a} - D\, e^{-ik_2a}\right] = k_1 F\, e^{ik_1a} \qquad (d)$$

De methode is nu als volgt: uit (c) en (d) kan F worden uitgedrukt in C en kan F worden uitgedrukt in D. Uit (a) en (b) kan C worden uitgedrukt in D. Door deze uitdrukking voor C in te vullen in de eerder gevonden ~~rel vergelijking~~ relatie tussen F en C ontstaan twee relaties tussen F en D. Hieruit kan F worden bepaald. Vervolgens kunnen C en D met de eerder gevonden relaties eenvoudig worden uitgedrukt in F. Daarna kan B m.b.v. (a) en (b) worden uitgedrukt in C en D en dus in F.

<u>Dus</u>:

Herschrijving van (d):

$$C\, e^{ik_2a} - D\, e^{-ik_2a} = \frac{k_1}{k_2} F\, e^{ik_1a} \qquad (e)$$

$$(c)+(e) \rightarrow \quad 2\, C\, e^{ik_2a} = \left(1+\frac{k_1}{k_2}\right) F\, e^{ik_2a} \qquad (f)$$
$$(c)-(e) \rightarrow \quad 2\, D\, e^{-ik_2a} = \left(1-\frac{k_1}{k_2}\right) F\, e^{ik_1a} \qquad (g)$$

Herschrijven van (b):

$$e^{-ik_1a} - Be^{ik_1a} = \frac{k_2}{k_1}\left[Ce^{-ik_2a} - De^{ik_2a}\right] \qquad (h)$$

$$(a)+(h) \rightarrow \quad 2e^{-ik_1a} = \left(1+\frac{k_2}{k_1}\right)Ce^{-ik_2a} + \left(1-\frac{k_2}{k_1}\right)De^{ik_2a}$$

$$\Rightarrow \quad C = \frac{1}{1+\frac{k_2}{k_1}}\left[2e^{-ik_1a} - \left(1-\frac{k_2}{k_1}\right)De^{ik_2a}\right]e^{ik_2a} \qquad (i)$$

(i) invullen in (f):

$$\left(\frac{k_1}{k_2}+1\right)Fe^{ik_1a} = \frac{2}{1+\frac{k_2}{k_1}}\left[2e^{-ik_1a} - \left(1-\frac{k_2}{k_1}\right)De^{ik_2a}\right]e^{ik_2a}\cdot e^{ik_2a}$$

$$\left(\frac{k_1}{k_2}+1\right)Fe^{ik_1a} - \frac{4}{1+\frac{k_2}{k_1}}e^{-ik_1a}e^{2ik_2a} = -2D\,\frac{1-\frac{k_2}{k_1}}{1+\frac{k_2}{k_1}}\,e^{ik_2a}e^{2ik_2a}$$

$$-\frac{\left(\frac{k_1}{k_2}+1\right)\left(1+\frac{k_2}{k_1}\right)}{1-\frac{k_2}{k_1}}Fe^{ik_1a}e^{-3ik_2a} + \frac{4}{1-\frac{k_2}{k_1}}e^{-ik_1a}e^{-ik_2a} = 2D \qquad (j)$$

$$\text{herschrijven } (g) \rightarrow \quad \left(1-\frac{k_1}{k_2}\right)Fe^{ik_1a}e^{ik_2a} = 2D \qquad (k)$$

$$(j)-(k) \rightarrow \quad F\left(\left(1-\frac{k_1}{k_2}\right)e^{ik_2a} + \frac{\left(\frac{k_1}{k_2}+1\right)\left(1+\frac{k_2}{k_1}\right)}{1-\frac{k_2}{k_1}}e^{-3ik_2a}\right) = \frac{4}{1-\frac{k_2}{k_1}}e^{-2ik_1a}e^{-ik_2a}$$

$$F = \frac{4\cdot e^{-2ik_1a}}{\left(1-\frac{k_2}{k_1}\right)\left(\left(1-\frac{k_1}{k_2}\right)e^{2ik_2a} + \frac{\left(\frac{k_1}{k_2}+1\right)\left(1+\frac{k_2}{k_1}\right)}{1-\frac{k_2}{k_1}}e^{-2ik_2a}\right)}$$

$$= \frac{4\cdot e^{-2ik_1a}}{\left(1-\frac{k_1}{k_2}-\frac{k_2}{k_1}+1\right)e^{2ik_2a} + \left(\frac{k_1}{k_2}+1+1+\frac{k_2}{k_1}\right)e^{-2ik_2a}}$$

$$= \frac{4\cdot e^{-2ik_1a}}{(2-\eta)e^{2ik_2a} + (2+\eta)e^{-2ik_2a}} \qquad \text{met } \eta = \frac{k_2}{k_1}+\frac{k_1}{k_2}$$

$$= \frac{4e^{-2ik_1a}}{4\cosh(2ik_2a) - 2\eta\sinh(2ik_2a)}$$

$$\left.\begin{array}{l}\sinh x = -i\sin ix\\ \cosh x = \cos ix\end{array}\right\} \Rightarrow \boxed{F = \frac{e^{-2ik_1a}}{\cos(2k_2a) - \frac{i\eta}{2}\sin(2k_2a)}} \quad \text{met } \eta = \frac{k_2}{k_1} + \frac{k_2}{k_1} \; (l)$$

Herschrijven (f): $C = \frac{1}{2}\left(\frac{k_1}{k_2}+1\right) F e^{ik_1a} e^{-ik_2a}$

$$\Rightarrow \boxed{C = F \cdot \frac{k_1+k_2}{2k_2} e^{i(k_1-k_2)a}}$$

Herschrijven (g): $D = \frac{1}{2}\left(1-\frac{k_1}{k_2}\right) F e^{ik_1a} e^{+ik_2a}$

$$\Rightarrow \boxed{D = F \cdot \frac{k_2-k_1}{2k_2} e^{i(k_1+k_2)a}}$$

$$(a)-(h) \rightarrow 2Be^{ik_1a} = \left(1-\frac{k_2}{k_1}\right)Ce^{-ik_2a} + \left(1+\frac{k_2}{k_1}\right)De^{ik_2a}$$

invullen van C en D hierin geeft:

$$2Be^{ik_1a} = \left(1-\frac{k_2}{k_1}\right)\cdot F \cdot \frac{k_1+k_2}{2k_2} e^{i(k_1-k_2)a} e^{-ik_2a} + \left(1+\frac{k_2}{k_1}\right)\cdot F \cdot \frac{k_2-k_1}{2k_2} e^{i(k_1+k_2)a} e^{ik_2a}$$

$$\Rightarrow B = \frac{1}{4}F\left\{\left(\frac{k_1-k_2}{k_1}\right)\left(\frac{k_1+k_2}{k_2}\right)e^{-2ik_2a} + \left(\frac{k_1+k_2}{k_1}\right)\left(\frac{k_2-k_1}{k_2}\right)e^{2ik_2a}\right\}$$

$$= \frac{1}{4}F\left\{\frac{k_1^2-k_2^2}{k_1k_2}e^{-2ik_2a} - \frac{k_1^2-k_2^2}{k_1k_2}e^{2ik_2a}\right\}$$

$$= \frac{1}{4}F\frac{k_1^2-k_2^2}{k_1k_2}\sinh(-2ik_2a)\cdot 2$$

$$\sinh x = -i\sin ix \Rightarrow B = \frac{1}{2}F\cdot\left(\frac{k_1^2-k_2^2}{k_1k_2}\right)\cdot -i\sin(2k_2a)$$

$$\Rightarrow \boxed{B = F\cdot i\,\frac{k_2^2-k_1^2}{2k_1k_2}\sin 2k_2a}$$

Nr. 1

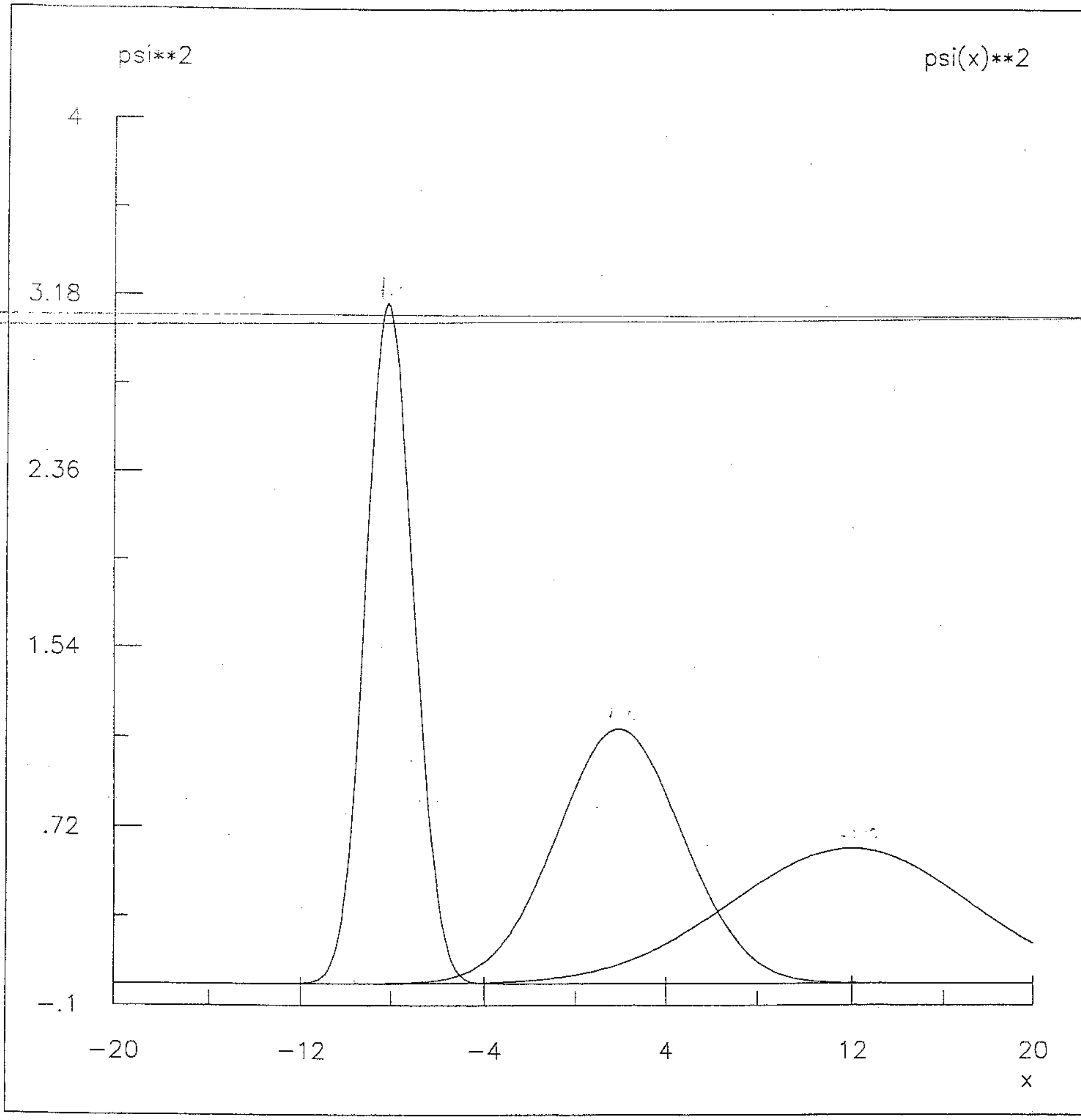
$E = 2$

$V = 0$

$x_0 = -8$

$\sigma =$

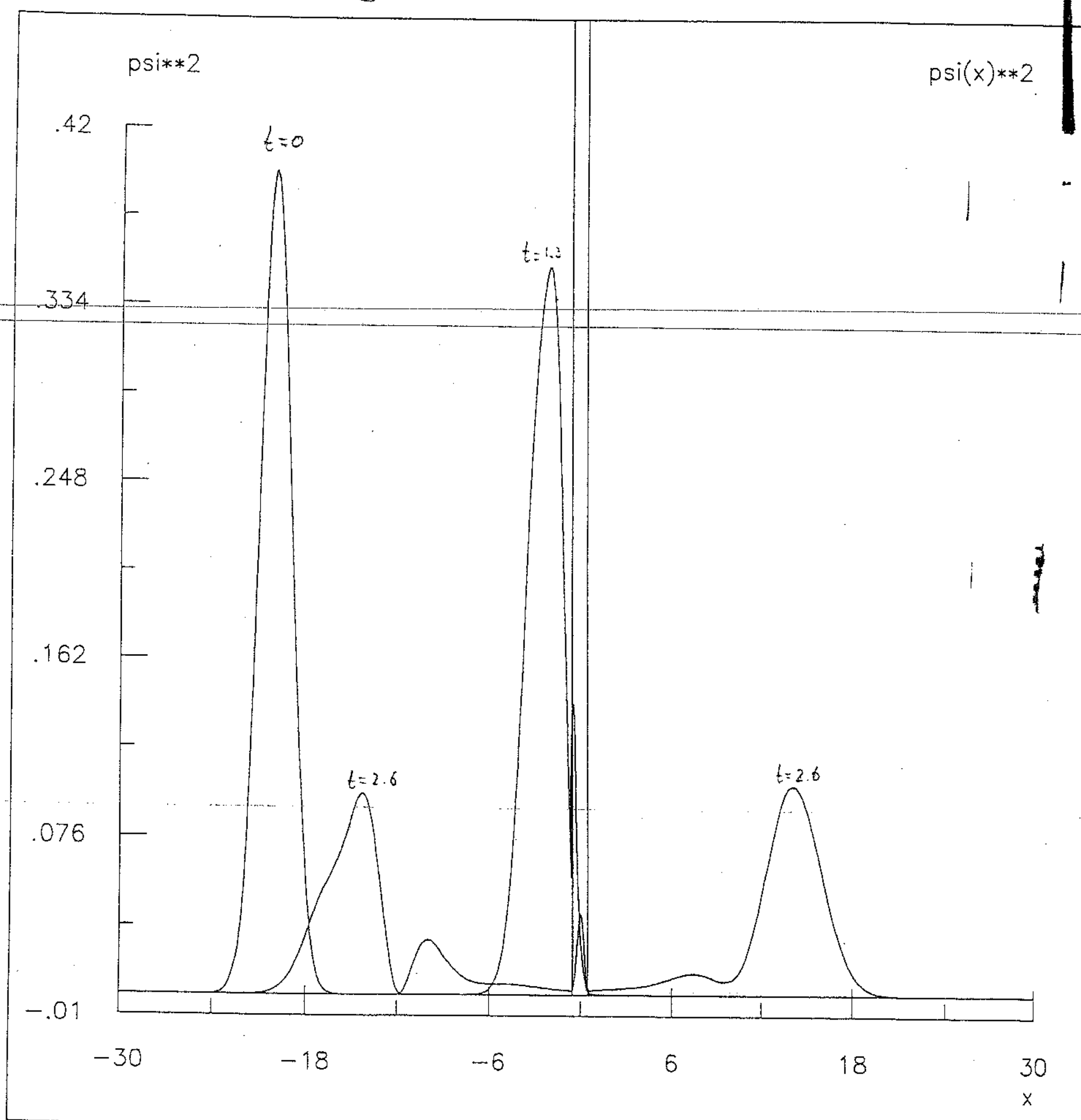
$\Delta x =$



r. 2

18 dec

$E = 100$
$V = 90$
$x_0 = -20$
$a = 0.5$
$dt = 1.3$
$\Delta x = 2\sqrt{2}$



nr. 5

$\Delta x = 0$

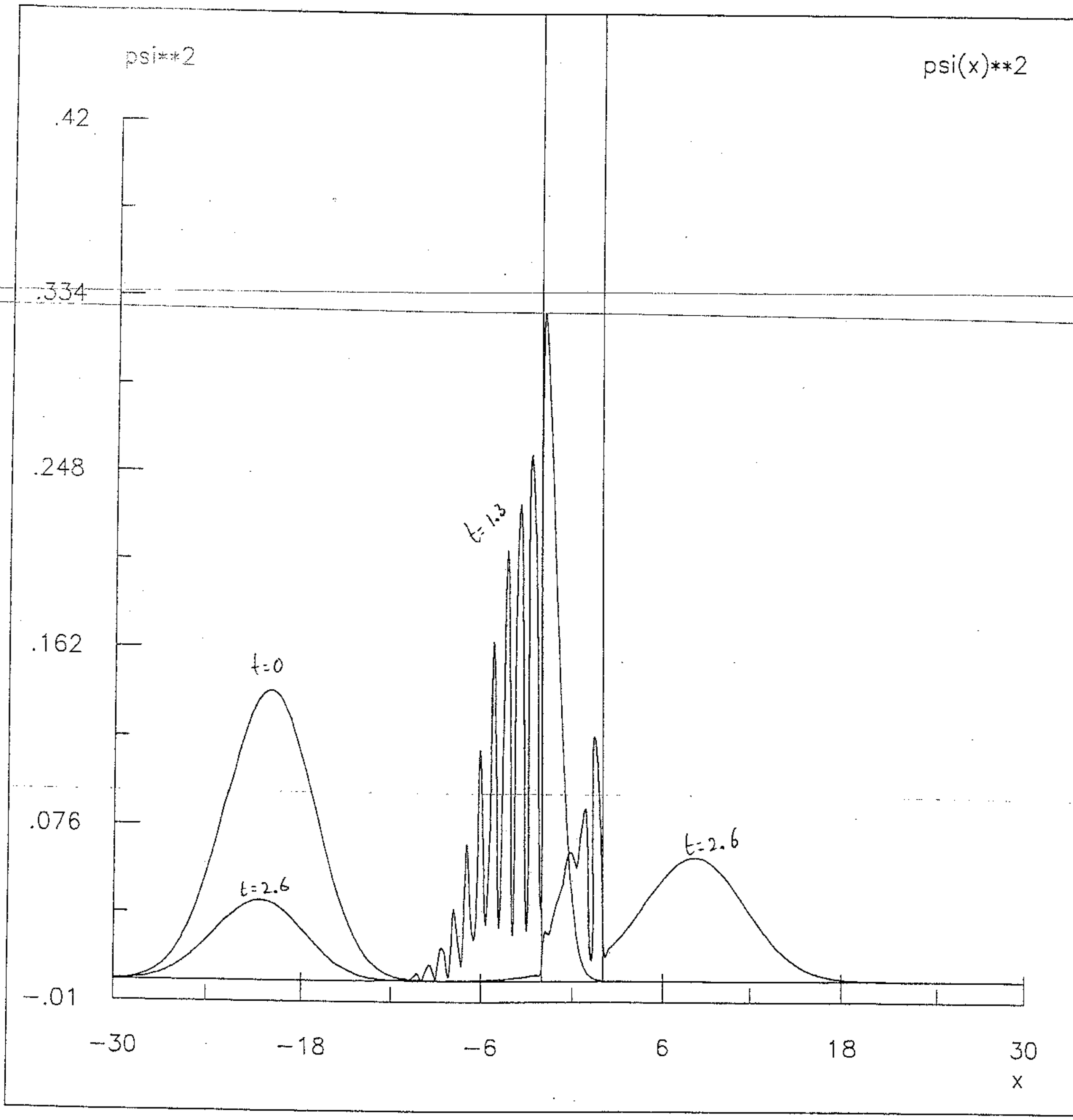
$E = 100$

$U = 90$

$x_0 = -20$

$a = 2$

20 sec

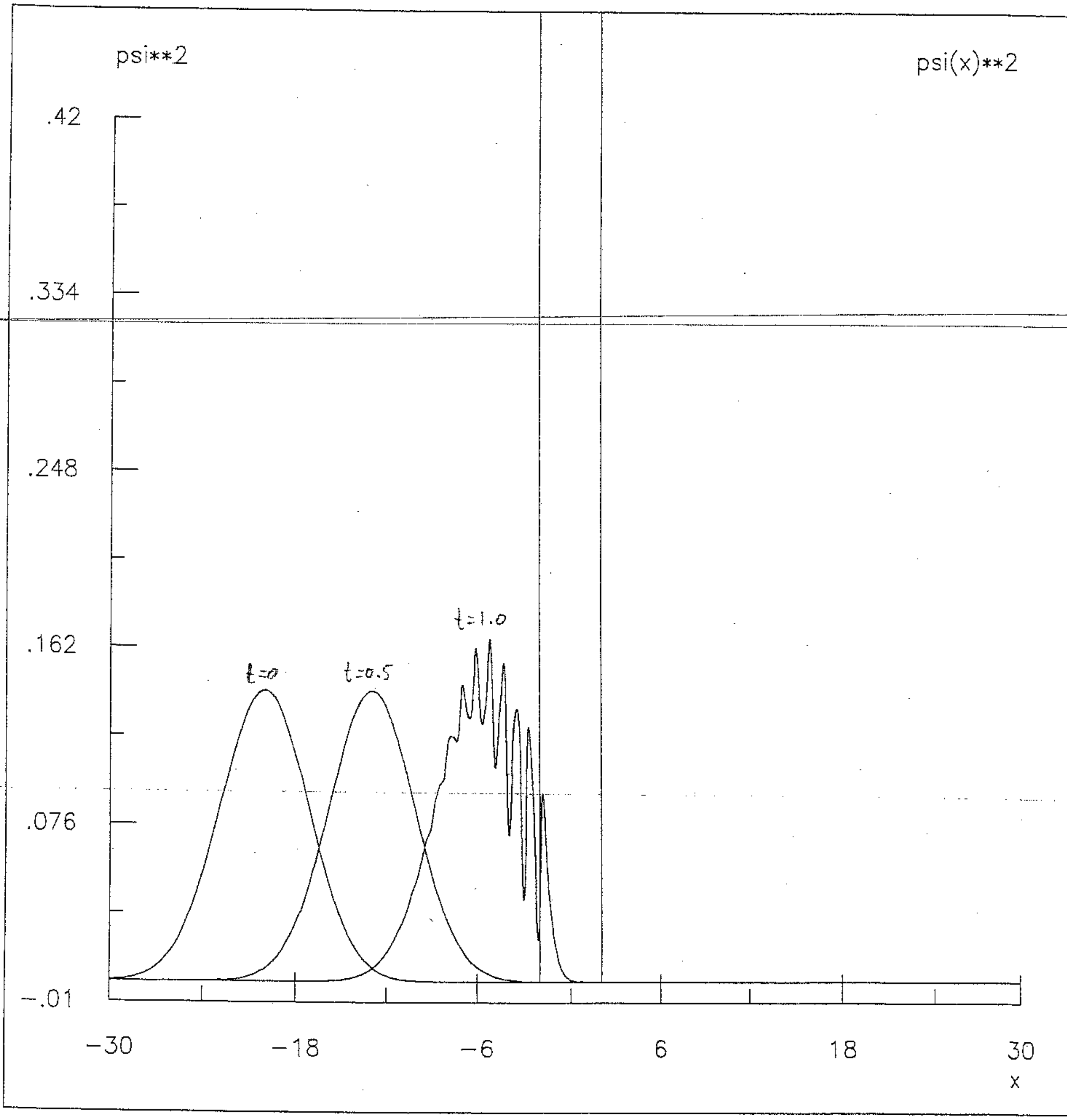


$\Delta x = \sigma$

$\bar{V} = 90$

$a = 2$

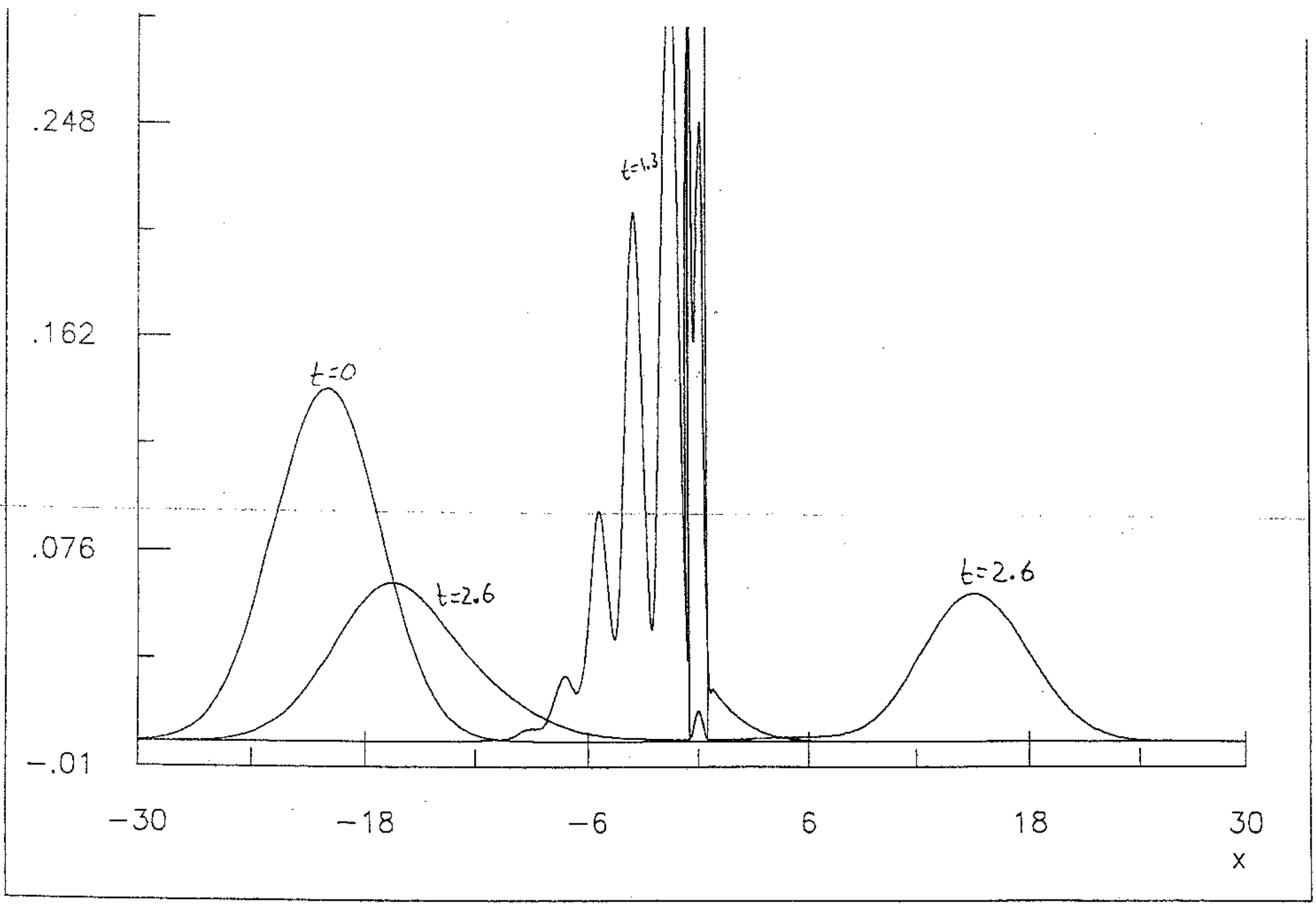
$x_0 = -20$



nr. 5

$\Delta x = 0 \quad E = 100 \quad V_0 = 90$

	I	II	III	total
$t=0$:	.9990	0	00	.9990
$t=1.3$	.7669	.1961	.0382	1.0013
$t=2.6$	.5686	0	.4314	1

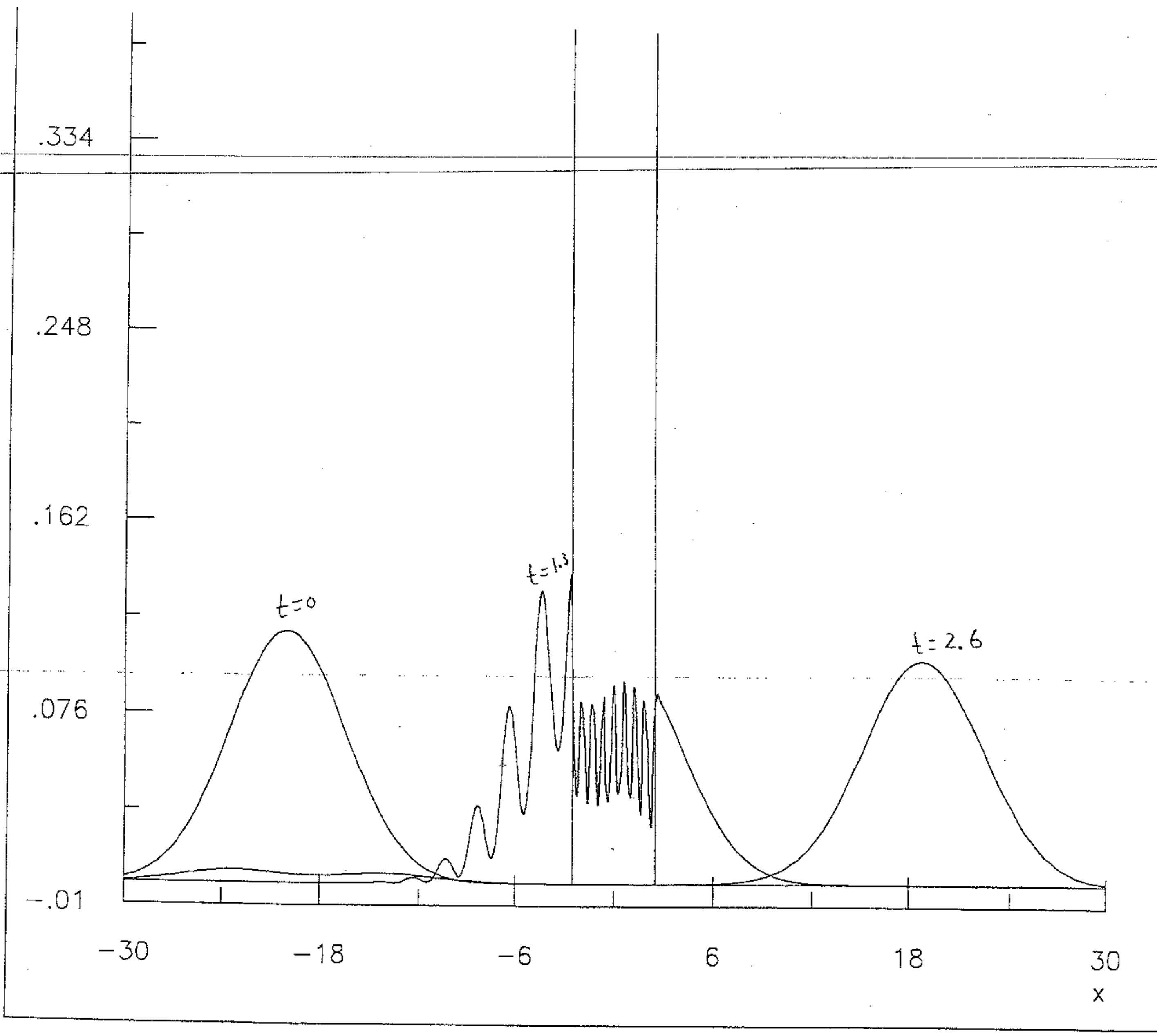


nr 6 ab 5 man

$\Delta x = 10$ $a = 2.5$

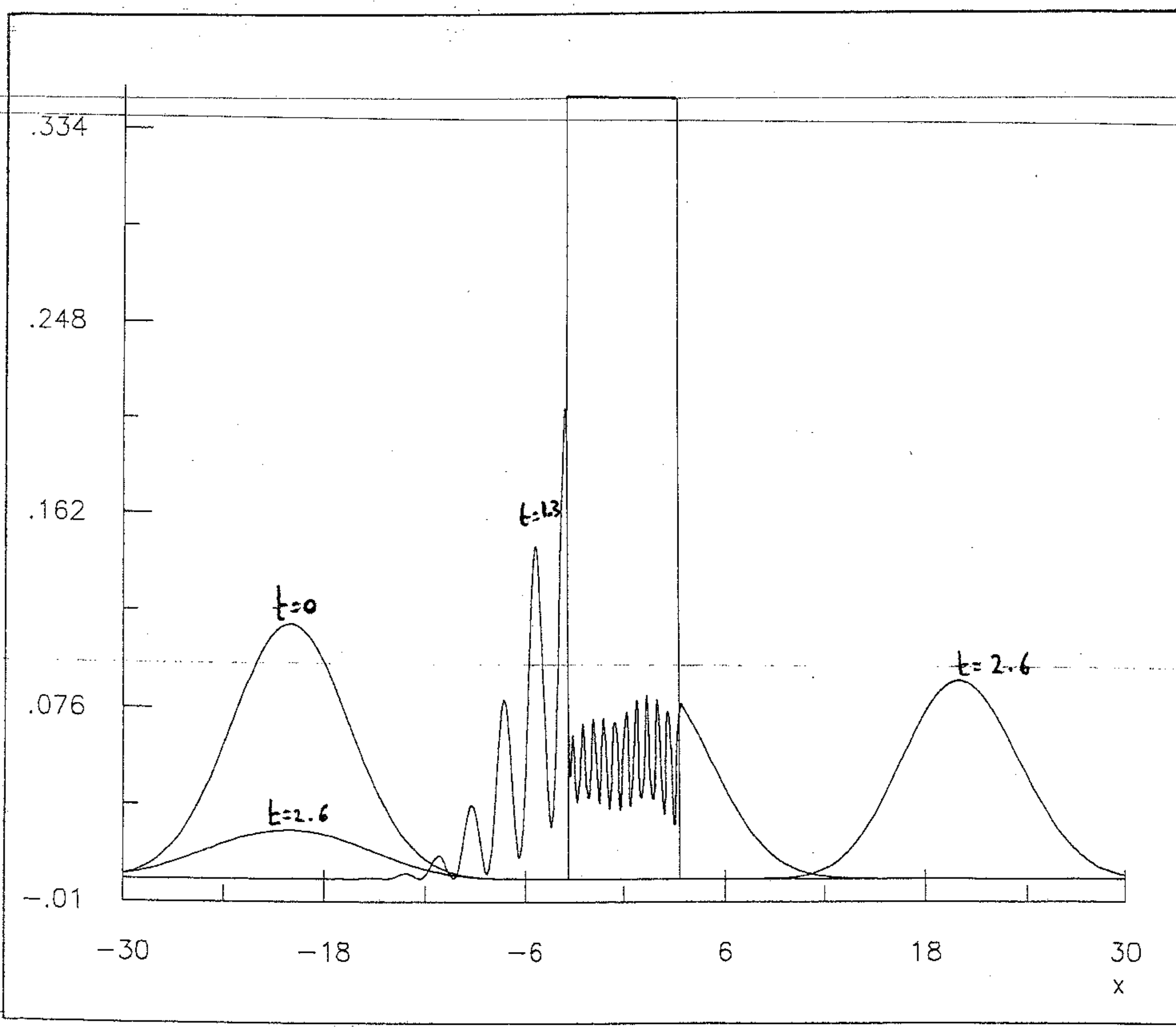
$V0 = -250$

	I	II	III	total
t = 1.3 :	.4257	.3015	.2623	1
2.6 :	.0763	.0074	.9220	1
theori:	.0762		.9220	1



nr. 7 als 6 maar a = 3. 3

ook hier klopt alles volgens theorie !



Met een DO-loop kunnen nu de arrays k1,k2 en phi gevuld worden.

Ad 2

Het programma gaat voor drie tijdstippen (t=0,t=dt,t=2dt) een grafiek maken van $|Psi|^2$ tegen x voor xbegin < x < xeind. Er wordt daartoe eerst een DO-loop gestart (DO q=0,2) waarin t=q*dt. Daarbinnen bevindt zich nog een DO-loop voor de x-waarden (DO teller=0,aantalx). Deze gebruikt de koppelingsvariabele 'teller'. De x-waarden worden opgeslagen in de array x1 zodat geldt x1(teller)=xbegin+teller*dx met dx=(xeind-xbegin)/aantalx. De integralen in de formules (12) worden vervangen door een eindige sommatie over phi(i) met i=-n,....,n. Daartoe wordt een derde DO-loop gestart (DO i=-n,n). Binnen deze loop wordt met behulp van IF-statements gekeken of de huidige x-waarde (x1(teller)) links of rechts van de potentiaalberg/put ligt of erbinnen. De benodigde factoren B,C,D en F worden berekend en vervolgens wordt een deel van Psi(x,t) bepaald. Met het tijdsafhankelijke deel EXP(-j*(k1(i)^2/2m)*t), de amplitude phi(i) en dk wordt pas buiten de IF-gedeelten vermenigvuldigd omdat dit in elk gebied hetzelfde is. Daarna wordt buiten de i-loop nog een keer vermenigvuldigd met een normeringsconstante omdat dit onafhankelijk is van i. De uiteindelijke waarde van $|Psi(x,t)|^2$ wordt opgeslagen in de array psixt(teller). De array's x1 en psixt worden na het beëindigen van de teller-loop naar een plot-routine gestuurd die er een grafiek van maakt. Hierna wordt dit herhaald voor een nieuwe t-waarde door de q-loop. Het uiteindelijke resultaat is een grafiek van het golfpakketje op drie verschillende tijdstippen.

Invoer

De volgende waarden zijn invoerparameters: deltax, E, V0, x0, a, dt, xbegin, xeind, aantalx. Deze waarden worden na het runnen van het programma uit het bestand 'param.dat' gehaald zodat de gebruiker ze niet de hele tijd hoeft in te voeren wanneer hij/zij ze toch niet verandert.

Transmissie

Het bestuderen van de grafieken geeft al een hoop informatie over de reflectie en de transmissie. Het programma voert echter ook nog enkele quantitatieve berekeningen uit. De eenvoudigste manier om de transmissiecoëfficient T en de reflectiecoëfficient R te bepalen is door het oppervlak onder $|Psi(x)|^2$ te berekenen. Als dit gebeurt voor een t-waarde waarop het gehele pakketje gereflecteerd en getransmitteerd is en er niets is achtergebleven in de potentiaalberg/put (gebied II), dan geldt dat T gelijk is aan het oppervlak onder $|Psi(x)|^2$ in gebied I en R gelijk is aan het oppervlak in gebied III (de golffunktie is immers genormeerd). Ook moet gelden dat T+R=1. Het bepalen van het oppervlak in de drie gebieden (oppI, oppII, oppIII) en het totale oppervlak (opp) gebeurt in het programma zodra psixt(teller) bekend is. Er wordt opnieuw gekeken of de huidge x-waarde (x1(teller)) zich in gebied I,II of III bevindt waarna de waarde van psixt(teller)*dx wordt opgeteld bij het juiste gebied. Het totale oppervlak wordt bepaald door de som van de drie gebieden te nemen. Dit resulteert in 4 oppervlaktes op 3 verschillende tijdstippen (dus 12 waarden) die worden uitgevoerd naar het scherm. Met behulp van de grafiek kan vervolgens gekeken worden op welk tijdstip het pakketje geheel gereflecteerd en getransmitteerd is maar nog niet van het scherm verdwenen is en welk van de oppervlaktes dus betrouwbaar is om als T of R te dienen.

Er bestaat echter nog een andere, elegantere manier om T en R te berekenen. Zoals eerder vermeld hangt de complexe factor F samen met de transmissie voor een bepaalde k. Het blijkt dat $T=|F|^2$ (zie Merzbacher (6.45)). Door nu het produkt van F en phi(k) te kwadrateren en te integreren over k kan de transmissiecoëfficient T van het hele pakketje berekend worden:

$$T = \int |phi(k) \cdot F|^2 \, dk \qquad (14)$$

(Deze formule heb ik min of meer intuïtief afgeleid uit het feit dat $T=|F|^2$ voor zekere k; de gevonden waarden blijken echter goed overeen te komen met de waarden gevonden door de oppervlakteberekeningen.)

Op dezelfde manier hangt R van de factor B af. Deze berekeningen worden apart uitgevoerd aan het einde van het programma: met een DO-loop (DO i=-n,n) wordt de integratie door middel van sommatie uitgevoerd. Het resultaat (T,R en T+R) wordt uitgevoerd naar het scherm.

Transmissie als funktie van de parameters

De programma's *vtrans*, *deltaxtrans* en *atrans* berekenen de transmissie-coëfficient T als funktie van respektievelijk V0, deltax en atrans. De transmissiecoëfficient wordt op dezelfde manier berekend als in het programma *gauss* (zie (14)), nu wordt dit echter gedaan voor verschillende waarden van de veranderlijke (resp. V0, deltax, a). De programma's vertonen zeer grote gelijkenis en hebben allemaal de volgende structuur: eerst worden de constante variabelen die niet afhangen van de veranderlijke (V0, deltax of a) gevuld. Hieronder valt ook het met een DO-loop vullen van één of meer van de arrays k1, k2 en phi, voorzover deze onafhankelijk zijn van de veranderlijke. Vervolgens wordt een DO-loop (DO teller=1,aantalx) gestart waarin de veranderlijke waarden aan neemt van nul tot het ingevoerde maximum, waarna telkens de transmissie wordt uitgerekend. De waarden van de veranderlijke worden opgeslagen in de array Vdata, deltaxdata resp. adata, de waarden voor de transmissiecoëfficient worden opgeslagen in de array transdata. Deze arrays zijn gekoppeld door de variabele teller. Om de transmissiecoëfficient te berekenen wordt binnen de teller-loop telkens een numerieke integratie uitgevoerd op dezelfde wijze als in het programma *gauss*.

Bij V0 als veranderlijke hangen de arrays k2 en phi af van V0: deze arrays moeten dus binnen de teller-loop worden gevuld (voor iedere waarde van V0 opnieuw). Voor de numerieke integratie om T uit te rekenen is er echter al een loop waarin de k-waarden doorlopen worden. De arrays k2 en phi kunnen dus binnen deze loop worden gevuld.

Bij deltax als veranderlijke is de variabele dk niet constant omdat deze afhangt van deltax (zie (13)). De arrays k1, k2 en phi kunnen dus in ieder geval niet van te voren gevuld worden, ook hier worden de arrays k1, k2 en phi tijdens de numerieke integratie pas gevuld.

Bij a als veranderlijke kunnen de arrays k1, k2 en phi in het begin van het programma al gevuld worden, ze hangen immers niet van a af.

Voor het invoeren van de parameters wordt in deze programma's dezelfde subroutine (invoer) en dezelfde file ('param.dat') gebruikt. In deze programma's hebben de invoerparameters x0, dt, xbegin en xeind echter geen betekenis. Deze dienen echter wel aanwezig te zijn in de file 'param.dat'. De variabele aantalx heeft een iets andere betekenis dan in het programma *gauss*: in deze drie programma's staat aantalx voor het aantal T-waarden dat berekend en geplot wordt. De overige invoerparameters hebben dezelfde betekenis als in *gauss*, behalve telkens de invoerparameter die in het betreffende programma de veranderlijke is: in dat geval is dit de maximum waarde van de veranderlijke die berekend wordt. Zo is bijvoorbeeld in het programma *vtrans* de invoerparameter V0 de maximum waarde waarvoor T berekend wordt.

Resultaten

De resultaten van dit experiment bestaan enerzijds uit een aantal plots waarin $|Psi(x)|^2$ voor enkele tijdstippen wordt uitgezet. Sommige van deze plots zijn voorzien van een uitdraai waarop de resultaten staan van de berekening van de oppervlakte onder de grafiek en een berekening van de reflectie- en transmissiecoëfficient. Anderzijds zijn er een aantal plots waarin de transmissiecoëfficient wordt uitgezet als funktie van één van de parameters V0, deltax en a.

De plots zijn genummerd en vormen bijlage C van dit verslag. Bij iedere plot zal enige toelichting worden gegeven.

$|Psi(x)|^2$ in de loop van de tijd

nr.

1 Hier geldt V0=0, dit betekent dat V overal gelijk is aan 0. De grafiek laat dus zien hoe een gaussisch golfpakketje zich als vrij deeltje beweegt. Het valt op dat het pakketje steeds breder wordt ten gevolge van de dispersie. Deze dispersie is het gevolg van het feit dat de energie relatief laag is. Hierdoor is de breedte van de gauss-kromme in de k-ruimte relatief groot ten opzichte van het centrale golfgetal k10. Een grote spreiding in de k-ruimte leidt tot dispersie. Door de energie groter te maken wordt de spreiding in de k-ruimte relatief kleiner. Toen ik hier achter kwam heb ik met hogere energiën geëxperimenteerd. Een andere mogelijkheid om de dispersie tegen te gaan is de breedte van het pakketje in de x-ruimte groter te maken zodat de spreiding in de k-ruimte kleiner wordt. Dit heeft echter weer tot gevolg dat de begin-coördinaat x0 van het pakketje verder naar links moet liggen omdat het pakketje anders op t=0 zich al voor een deel in de potentiaalberg/put bevindt. Als x0 meer naar links komt te liggen moet er weer langer worden gewacht tot het hele pakketje door de berg/put heen is en in die tijd zal het pakketje ten gevolge van de dispersie dus ook weer breder worden. (Wet van behoud van Ellende). Het blijkt echter dat het pakketje ook niet te smal moet zijn.

Het centrum van het pakketje legt in 10 tijdseenheden 20 lengte-eenheden af. Dit betekent een snelheid van 2 (dimensieloos vanwege natuurlijke coördinaten). Deze snelheid kan ook uit de energie E van het deeltje berekend worden: $v=\sqrt{(2E/m)}=2$. Dit klopt dus. Deze snelheid is omgerekend naar SI-eenheden 2 maal de lichtsnelheid; dit is echter geen echt probleem omdat alle formules niet-relativistisch zijn.

2 In deze plot nadert een naar rechts bewegend pakketje een potentiaalberg met een hoogte van 90% van de energie van het pakketje. Klassiek gezien zou een deeltje dus over deze berg heen gaan en weer verder bewegen. Quantummechanisch is dit echter niet het geval: op t=1.3 bevindt het pakketje zich aan de rand van de berg, op t=2.6 is het pakketje gesplitst in een deel dat gereflecteerd is en naar links beweegt en een deel dat doorgelaten is en verder naar rechts beweegt. De pakketjes zijn niet meer helemaal gussisch: er beweegt nog een staartje achteraan. Dit is te wijten aan het feit dat de spreiding in de k-ruimte te groot is en V0 en E dicht bijelkaar liggen. Hierdoor is er te veel verschil tussen het gedrag van de hoogste en de laagste golfgetallen van het pakketje: de grootste golfgetallen zullen bijna allemaal worden doorgelaten en de kleinste bijna allemaal gereflecteerd.

3 Dit is bijna dezelfde situatie als in 2, alleen is de berg put hier iets breder en (belangrijk) het pakketje breder. Door dit laatste is het pakketje na reflectie en doorlating wel gaussisch. Zeer opvallend zijn de staande golven die op t=1.3 te zien zijn wanneer het pakketje met de berg botst en lijkt te interfereren met zichzelf.

4 Pakketje nadert potentiaalberg en botst. Ook hier ontstaan staande golven in het pakketje.

5 Bij deze plot zijn ook berekeningen van de oppervlakte onder de grafiek in de drie gebieden en berekeningen van de reflectie- en transmissie-coëfficiënt. De oppervlakte in gebied I op t=2.6 kan geïnterpreteerd worden als de reflectiecoëfficiënt en de oppervlakte in gebied III op t=2.6 als de transmissiecoëfficiënt. Ook zijn met behulp van numerieke integratie R en T berekend volgens formule (14). Deze komen inderdaad goed overeen met de oppervlaktes.

6 Dit is geen potentiaalberg maar een potentiaalput met een diepte van 2.5 maal de energie. Opvallend zijn de staande golven in de put. Bijna het hele pakketje (92%) wordt doorgelaten.

7 Bijna hetzelfde als 6, alleen is de put hier iets breder. Dit leidt echter wel tot meer reflectie. De reflectie hangt dus ook af van de breedte van de put en niet alleen van de diepte. Hierover later meer.

Transmissiecoëfficient als funktie van V0, deltax en a

nr

10 T als funktie van V0. Voor een lage berg geldt inderdaad dat T=1 en voor een hoge dat T=0. Klassiek zou men voor deze grafiek echter een sprongfunktie verwachten: quantummechanisch blijkt er echter ook een tussengebied te bestaan waarin gedeeltelijke reflectie en gedeeltelijke transmissie is. Ook lijkt er voor bepaalde V0 waarden een soort resonantie op te treden. Dit is als volgt te verklaren: voor het centrale golfgetal k20 (lees: k twee, nul) in de potentiaalberg geldt k20=√(2m(E−V0)). Bij dit centrale golfgetal k20 hoort een golflengte lambda waarvoor geldt lambda=2π/k20. Het is nu denkbaar dat er resonanties in de transmissie optreden wanneer de halve golflengte (lambda/2) precies een geheel aantal maal in de breedte (=2a) van potentiaalberg past. Voor deze lambda's geldt:

$$n\cdot(\text{lambda}/2) = 2a \qquad n = 1,2,3,\ldots$$

Aangezien lambda=2π/√(2m(E−V0)) geldt dan:

$$n\cdot(2\pi/\sqrt{2m(E-V0)})/2 = 2a$$

En hieruit volgen de volgende resonantie-waarden van V0:

$$V0 = E - (\pi^2 n^2)/(8ma^2) \qquad n = 1,2,3,\ldots$$

In de volgende tabel worden de berekende resonantiewaarden voor V0 vergeleken met de uit de grafiek bepaalde waarden voor a=0.5, E=100 en m=1:

n	V0 berekend	V0 bepaald
1	95.07	94.3 ± 0.5
2	80.26	80.2 ± 0.5
3	55.59	55.6 ± 0.5
4	21.04	20.7 ± 0.5
5	-23.37	

De berekende waarden komen goed overeen met de uit de grafiek bepaalde waarden.

11 In deze grafiek staat voor twee verschillende waarden van a de transmissiecoëfficient uitgezet tegen de hoogte van de berg. In de volgende tabel worden opnieuw de berekende resonantiewaarden voor V0 vergeleken met de uit de grafiek bepaalde waarden voor a=0.4, E=100 en m=1:

n	V0 berekend	V0 bepaald
1	92.29	91.4 ± 0.5
2	69.16	68.5 ± 0.5
3	30.60	30.5 ± 0.5
4	-23.37	

Ook hier zijn de berekende waarden in overeenstemming met de uit de grafiek bepaalde waarden.
De kromme voor a=5.4 vertoont geen resonantie-waarden meer: het is een monotoon dalende functie. De verklaring hiervoor luidt als volgt: in de voorgaande beschouwing is het hele spektrum van golfgetallen vereenvoudigd tot een centraal golfgetal. Dit is een terechte vereenvoudiging zolang de bij dat golfgetal behorende halve golflengte slechts een klein aantal maal in de breedte van de berg past. In dat geval passen de halve golflengtes die weinig van deze centrale halve golflengte verschillen namelijk ongeveer dat zelfde geheel aantal maal in de berg. Wanneer echter de breedte van de berg groter wordt, past de halve centrale golflengte al gauw een groot aantal maal in de breedte

van de berg. Dit betekent dat de halve golflengtes die weinig van de centrale golflengte verschillen niet meer ongeveer dat zelfde gehele aantal maal in de berg passen: het fase-verschil tussen de centrale golflengtes en de rest wordt te groot. Hierdoor middelt het resonantie-effect van de centrale golflengte uit tegen de effecten van de omliggende golflengtes.

12 In deze plot is de transmissie uitgezet tegen de diepte van een potentiaalput. Ook hier bestaan er bepaalde resonantiewaarden voor V0. Om na te gaan of de eerder beschreven theorie ook geldt voor een potentiaalput worden in de volgende tabel de volgens deze theorie berekende resonantiewaarden voor V0 vergeleken met de uit de grafiek bepaalde waarden, voor a=1.5, E=100 en m=1:

n	V0 berekend	V0 bepaald
20	-119.32	-119.1 ± 1.5
21	-141.81	-140.4 ± 1.5
22	-165.38	-164.5 ± 1.5

Ook hier leidt de theorie tot een bevredigende verklaring van de resonantiewaarden voor V0.

13 Zelfde als plot 12, nu voor iets grotere waarde van a waardoor het aantal resonantiewaarden toe neemt.

14 In deze plot staat de transmissiecoëfficient uitgezet tegen de halve breedte a van de potentiaalberg. De maximima in de plot zijn hebben dezelfde oorzaak als de maxima in plot 10. Bij plot 10 bestonden er voor vaste a resonantiewaarden voor V0, hier bestaan er voor vaste waarde van V0 resonantiewaarden voor a. Uit de grafiek blijkt ook dat voor grotere waarden van a de resonanties verdwijnen en de transmissie convergeert naar een vaste waarde (hetzelfde effect is in plot 11 te zien).

15 Ook hier is duidelijk te zien dat T voor grote a convergeert naar een bepaalde waarde en de resonanties verdwijnen. Wanneer deze plot vergeleken wordt met plot 14 blijkt dat wanneer de breedte van het golfpakketje deltax afneemt, de transmissiecoëfficient sneller convergeert. Dit is geheel in overeenstemming met de bij plot 11 genoemde verklaring voor het feit dat voor grote a de resonanties verdwijnen: als deltax afneemt, wordt de breedte van de gauss-kromme in de k-ruimte juist groter; hierdoor lopen de golflengtes die om de centrale golflengte liggen eerder uit fase met de centrale golflengte. De resonanties verdwijnen dan dus sneller.

16 Zelfde als plot 15, alleen is deltax iets groter.

17 Hier is T uitgezet tegen a voor verschillende waarden V0. Zoals verwacht convergeert de transmissie voor lagere V0 naar hogere waarden.

18 In deze plot staat de transmissiecoëfficient uitgezet tegen de breedte van het inkomende golfpakketje deltax. De grilligheid van de grafiek heb ik niet kunnen verklaren.

19 Zelfde als plot 18, alleen is hier wat "ingezoomd". Het lijkt er op dat voor kleine waarden van deltax de transmissiecoëfficient T naar 1 nadert.

20 Zelfde als plot 19, alleen is hier de halve breedte a van de potentiaalberg 2 maal zo groot. De grafiek houdt echter dezelfde vorm.

21 Zelfde als plot 19, alleen nog verder "ingezoomd". Het blijkt dat T inderdaad naar 1 nadert als deltax naar 0 nadert. Een goede verklaring heb ik hier niet voor kunnen vinden. Een mogelijkheid is dat in de limiet van deltax nadert naar 0 de klassieke mechanica weer kan worden toegepast en dat de transmissie voor E>V0 dus gelijk is aan 1. Deze veronderstelling blijkt echter onjuist zoals uit de volgende plot blijkt.

22 Zelfde als plot 21, alleen geldt hier V0=250, dus E<V0. Ook hier nadert de transmissie voor kleine deltax naar 1 terwijl E<V0. Een bevredigende verklaring ontbreekt nog.

Evaluatie

Het doen van dit experiment heeft mijn inzicht in dit soort problemen en met name het verband tussen de plaats- en de impulsruimte in de quantum-mechanica aanzienlijk vergroot. Het voordeel van het inschakelen van de computer is dat er met een minimum aan wiskunde een maximum aan resultaten kan worden verkregen.
~~Er zijn zeker nog wel een aantal verbeteringen en uitbreidingen mogelijk.~~
Een bijna noodzakelijke verbetering, waar ik niet aan toe gekomen ben, is het integreren van de 4 programma's tot één gebruikersvriendelijk, menu-gestuurd programma. De programma's lijken zoveel op elkaar, vooral de drie transmissie-programma's, dat ze er gewoon om vragen om geïntegreerd te worden.
Niet alle verschijnselen die mij in de stroom van output bereikten heb ik kunnen verklaren. In een vervolgexperiment zou de nadruk wat meer kunnen liggen op de fysische interpretatie van de resultaten.

Literatuur

- E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*
  Second Edition 1970, Wiley, New York.

- Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*
  1980, Holden-Day, San Francisco.

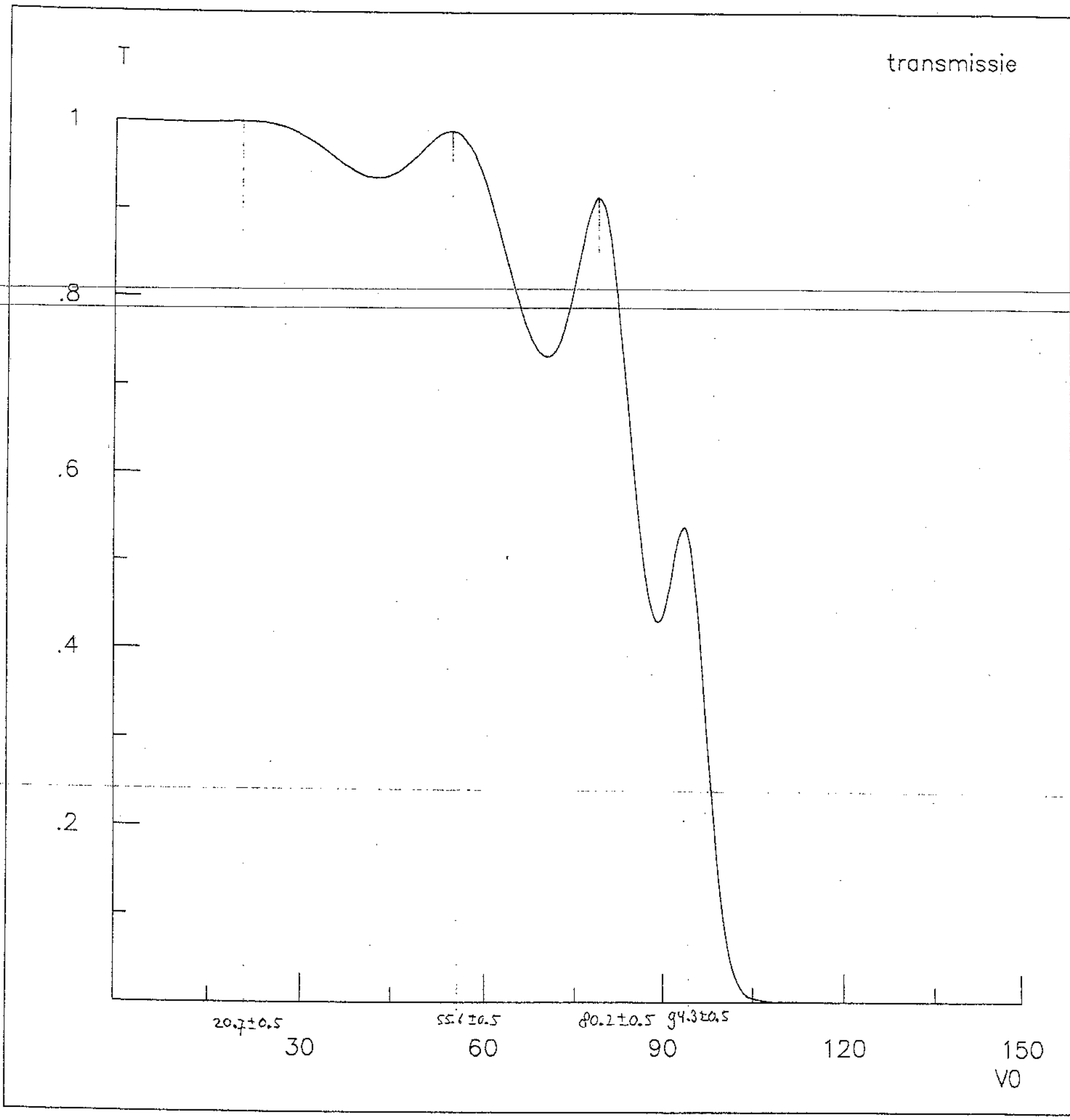
- Map Quantum Mechanica met hoofdstuk 10 en 12 uit Merril

- Syllabus *Klassieke Mechanica*, C.G. van Weert, 1991
  paragraaf 1.3.2 Natuurlijke Eenheden

nr. 10

$\Delta x = \delta$
$\underline{E} = 100$
$a = 0.5$

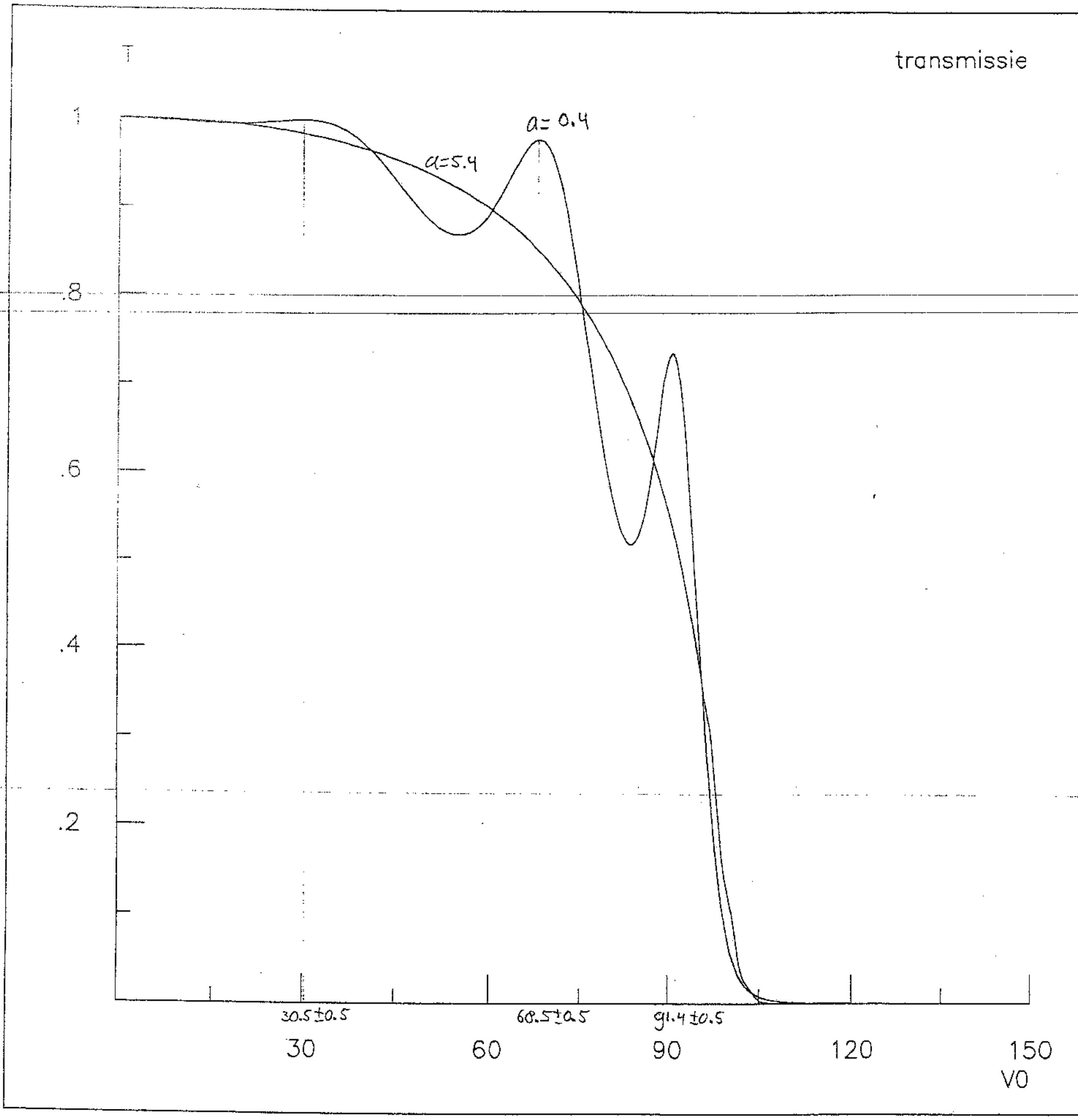
lg dec



nr. 11

$\Delta x = 8$
$F = 100$

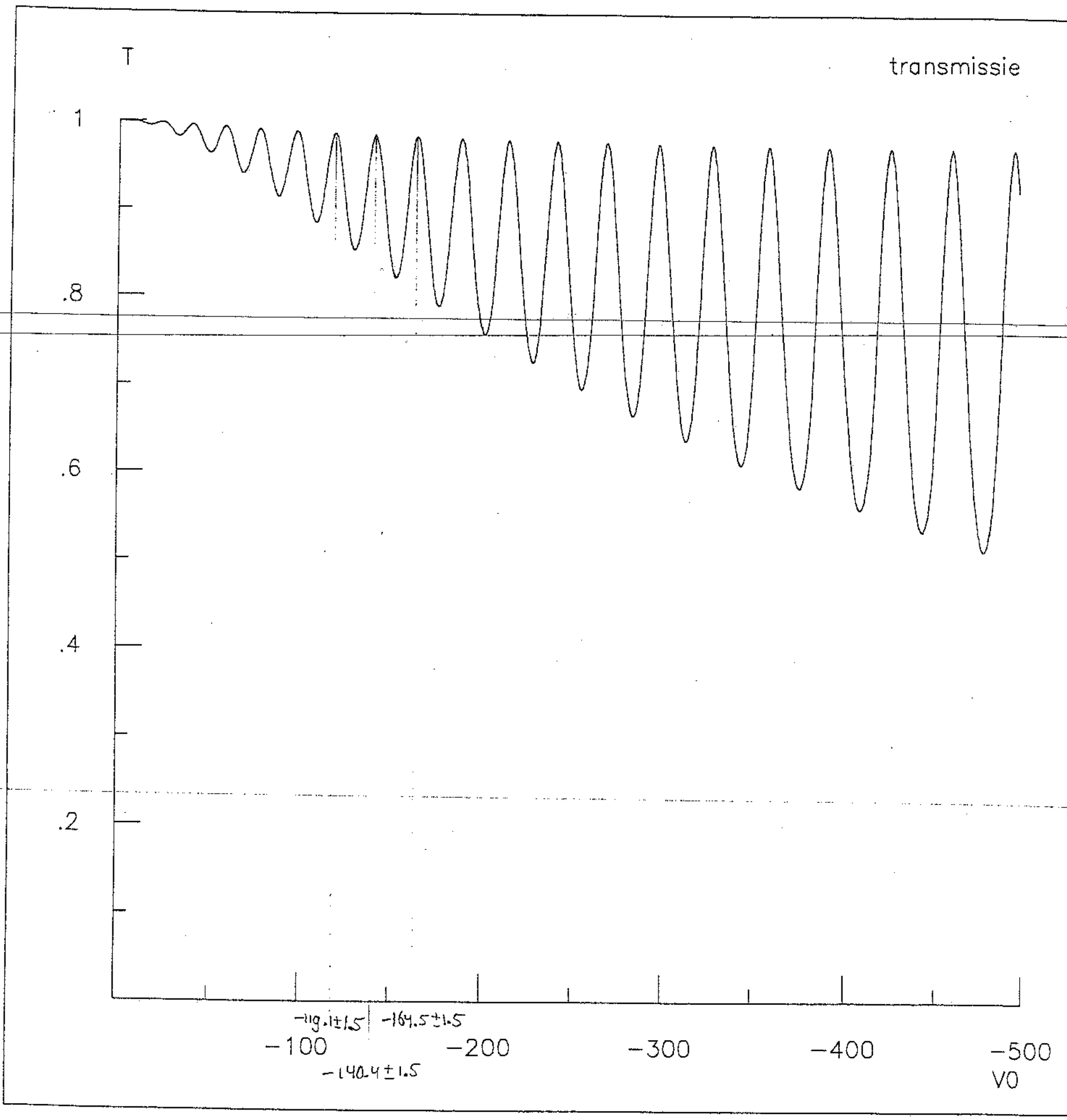
19 dec



.r 12

$\Delta x = 10$
$E = 100$
$a = 1.5$

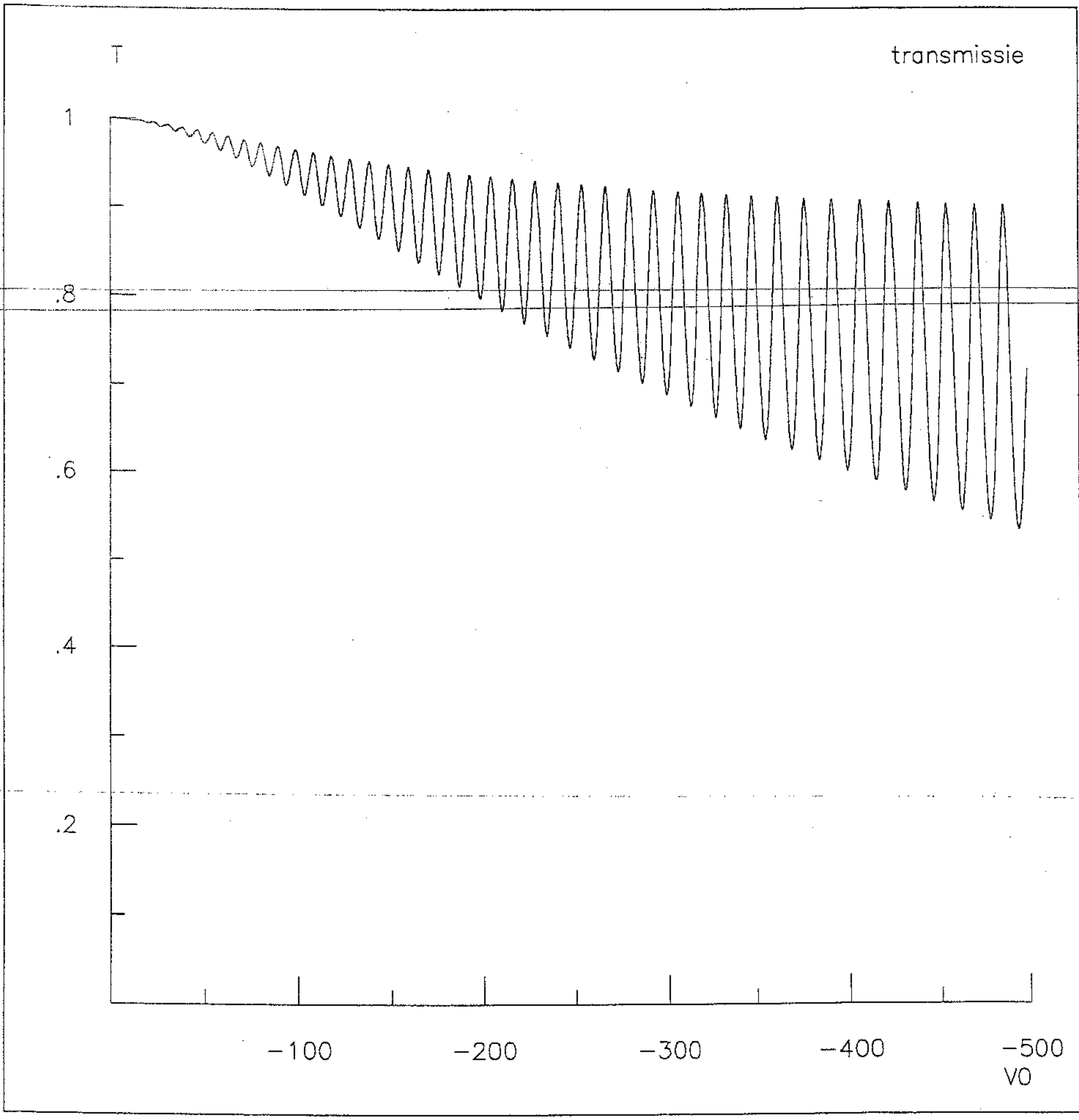
ig nee



nr. 13

$\Delta k = 10$
$E = 100$
$d = 3.3$

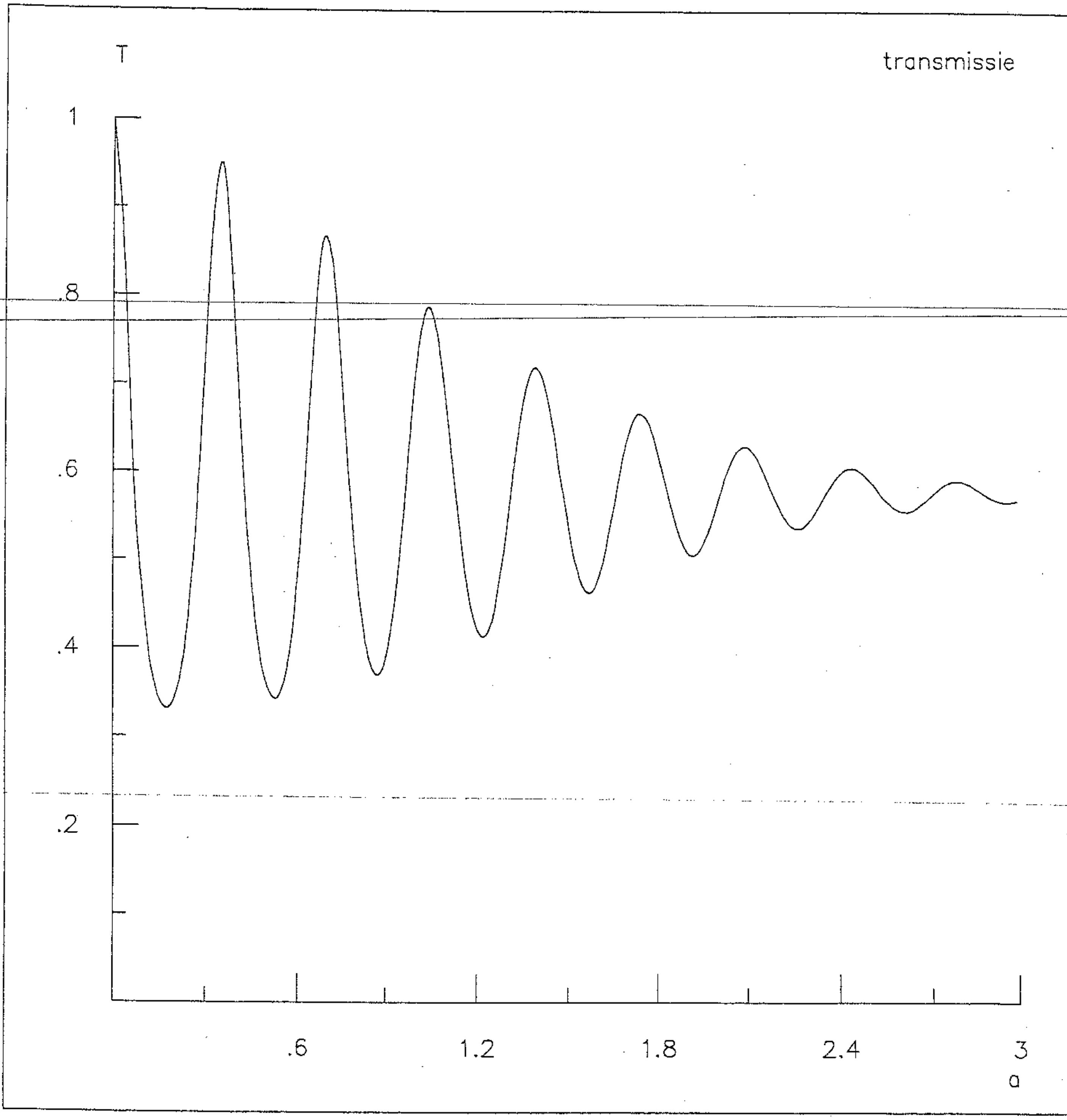
19 dec



nr. 14 $\Delta x = 20$ lg dec

$E = 100$

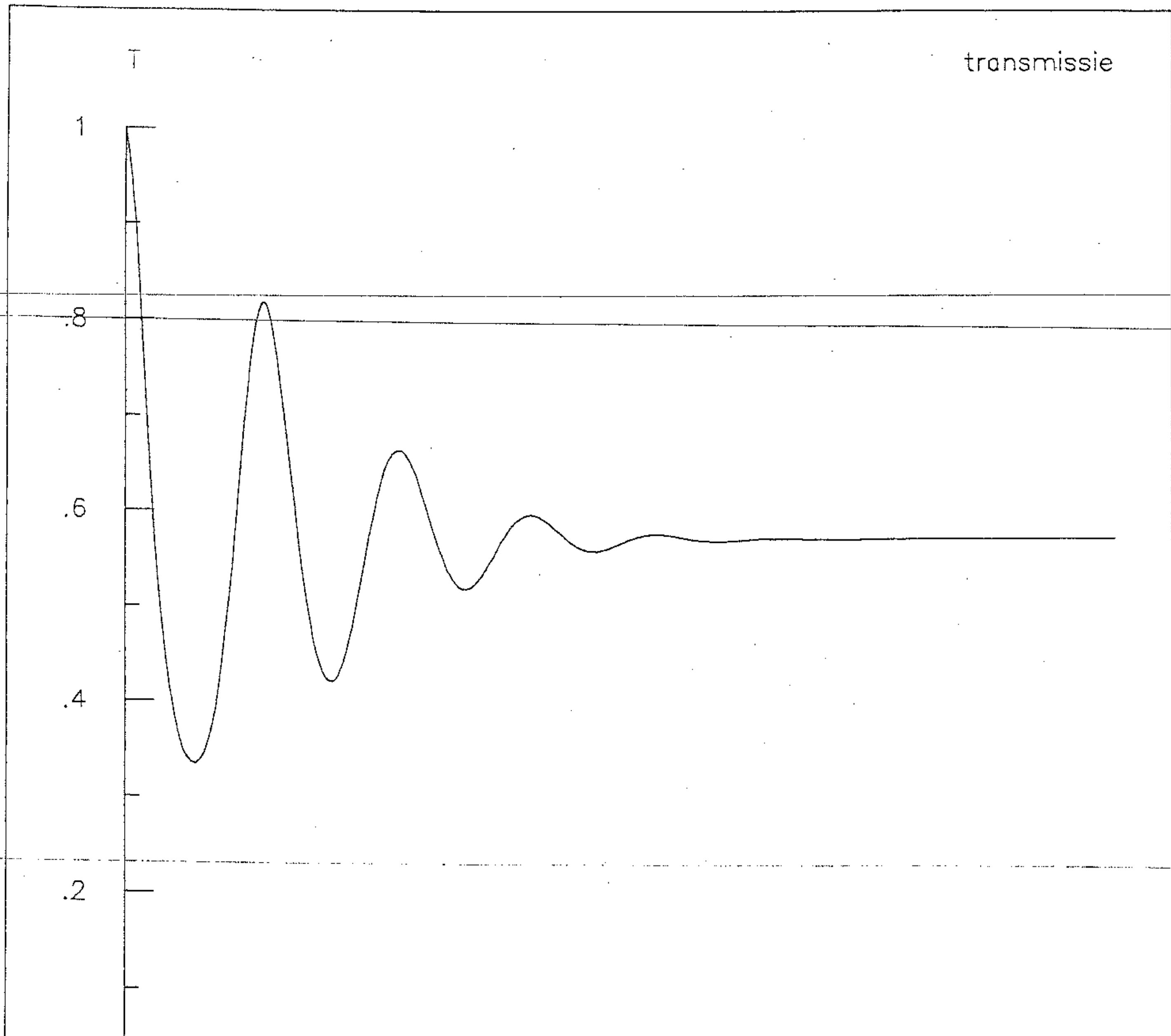
$V0 = 90$



nr. 15

$\Delta x = 8$
$E = 100$
$V0 = 90$

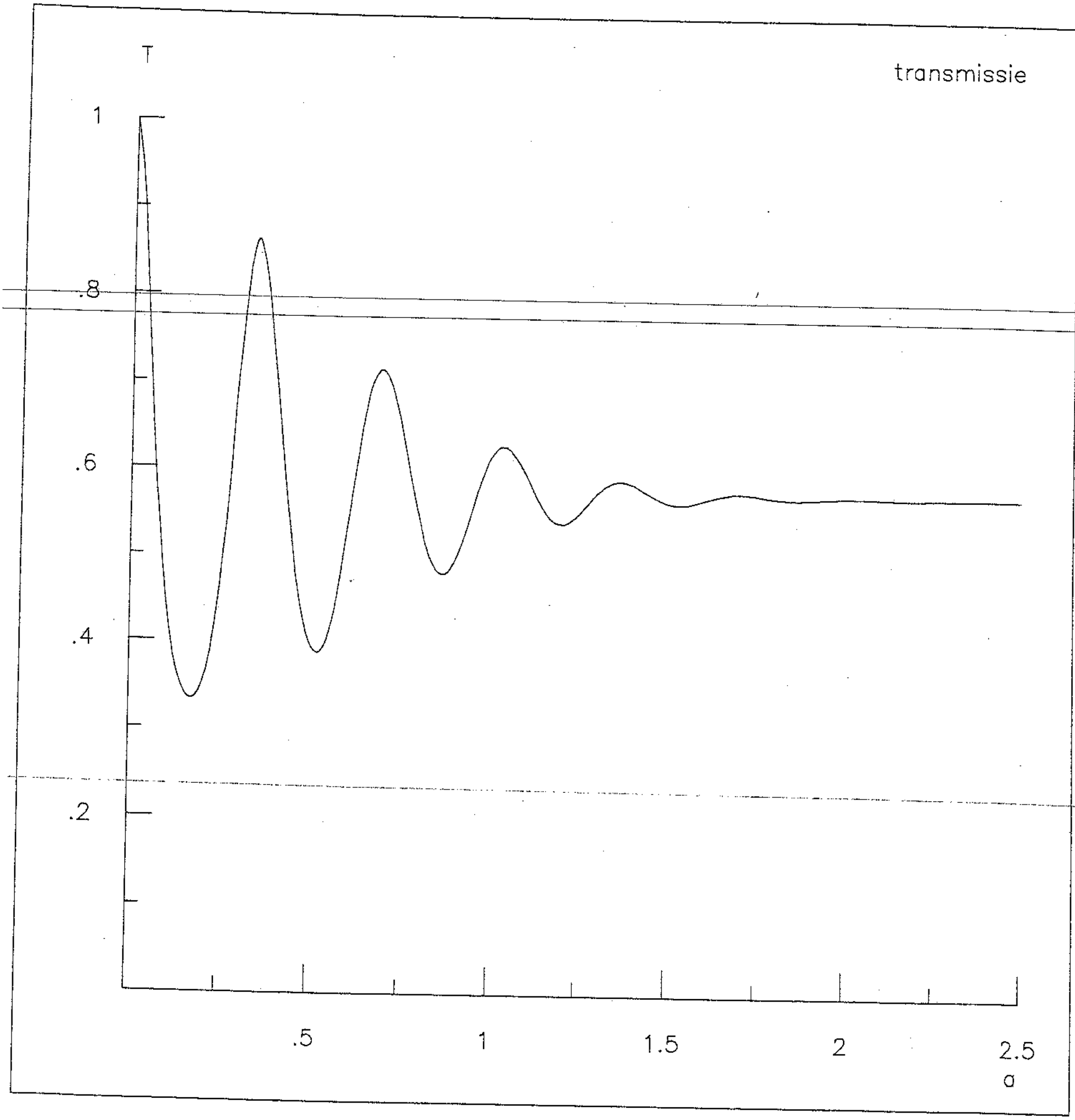
19 dec



nr. 16

$\Delta x = 10$
$E = 100$
$V0 = 90$

lg dec



nr. 17

$\Delta x = 10$
$E = 100$

19 dec