

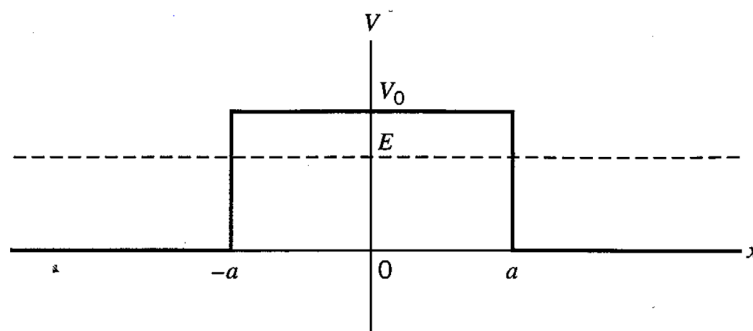
Quantum Tunneling

Rob Hesselink

Maart 2018

Inhoudsopgave

1	Introductie	2
2	De Schrödingervergelijking	2
3	Eigentoestanden van de barrière	3
4	Methode: $\Psi(x, t)$	4
5	Resonantie	5
6	Appendix 1	6



Figuur 1: Een 1-dimensionale potentiaalbarrière uit “Quantum Mechanics” door E. Merzbacher[1].

1 Introductie

In deze opgave gaan we kijken naar quantum tunneling. Quantum tunneling is nodig voor de beschrijving van scanning-tunneling microscopie, energieproductie in de zon en het wissen van flashgeheugen. In deze opgave modelleren we een 1-dimensionaal tunnelingprobleem. Een Gaussisch golfpakket nadert een rechthoekige potentiaal beschreven door:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{als } x < -a & \text{(Regio I)} \\ V_0 & \text{als } -a \leq x \leq a & \text{(Regio II)} \\ 0 & \text{als } x > a & \text{(Regio III)} \end{cases}$$

Zodra het golfpakket tegen de barrière botst op $x = -a$, zal een deel gereflecteerd worden en een deel door de potentiaal tunnelen. Het deel dat zich door de barrière beweegt zal op $x = a$ wederom in twee delen splitsen. Dit herhaalt zich totdat de golf functie in de potentiaal verwaarloosbaar klein wordt. Door het berekenen van de oppervlakte onder de functie links en rechts van de potentiaal, kunnen de transmissie- en reflectiecoëfficiënten T en R gevonden worden.

Deze opgave bevat twee doelstellingen:

1. Het berekenen van T en R.
2. Het beschrijven van resonante toestanden in de potentiaalbarrière.

2 De Schrödingervergelijking

We beginnen de analyse van dit probleem met het oplossen van de Schrödingervergelijking, om zowel de vorm van de eigentoestanden en hun tijdsverloop te bepalen. Allereerst nemen we aan dat de golf functies separabel zijn, zodat geldt:

$$\Psi(x, t) = \Psi(x)f(t) \tag{1}$$

Als we dit invullen in de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking geeft dit:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x) = E\Psi(x) \tag{2}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t) = Ef(t) \tag{3}$$

Hierbij is de constante E de energie van de eigentoestanden. De oplossing van het tijdsafhankelijk deel is snel gevonden en luidt:

$$f(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (4)$$

De oplossingen van het plaatsafhankelijke deel vereisen echter wat meer werk.

3 Eigenttoestanden van de barrière

Voor het plaatsafhankelijke deel in de buurt van de barrière doen we de volgende aanname:

$$\Psi_b(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & \text{als } x < -a \\ Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} & \text{als } |x| < a \\ Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x} & \text{als } x > a \end{cases}$$

Het is nu mogelijk om de coëfficiënten k_1 en k_2 te bepalen door de aanname in te vullen in de plaatsafhankelijke Schrödingervergelijking. Hieruit volgt dat:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}.$$

In deze opgave beginnen we met een golf die van links de barrière nadert. Dit betekent dat we mogen stellen dat $G = 0$. Het is echter wel belangrijk dat de functies en hun afgeleiden op de randen van de barrière continu zijn. Hieruit volgen vier vergelijkingen en na het stellen $A = 1$ blijven er vier onbekenden over. Het blijkt mogelijk om de coëfficiënten uit te drukken in F . Dit geeft de volgende relaties:

$$F = \frac{e^{2ik_1a}}{\cos(2k_2a) - \frac{i\eta}{2} \sin(2k_2a)} \quad (5)$$

$$C = F \cdot \frac{k_1 + k_2}{2k_2} e^{i(k_1 - k_2)a} \quad (6)$$

$$D = F \cdot \frac{k_2 - k_1}{2k_2} e^{i(k_1 + k_2)a} \quad (7)$$

$$B = F \cdot i \frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1k_2} \sin(2k_2a) \quad (8)$$

met $\eta \equiv \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1}$. De bijbehorende berekening is te vinden in appendix 1.

4 Methode: $\Psi(\mathbf{x}, t)$

Om deze opgave numeriek op te lossen, dienen we een aantal variabelen te discretiseren. Het gaat hierbij om tijd, ruimte en golfgetal. De toegestane waarden kunnen vervolgens worden opgeslagen in lijsten of arrays. Het is hierbij belangrijk om te zorgen dat er geen *aliasing* ontstaat. Maak dus een goede keuze voor de grootte van Δk en Δx en gebruik arrays met genoeg waarden!

Zoals gezegd beginnen we op $t = 0$ met een Gaussisch golfpakket met breedte Δx en impuls $p_0 = \hbar k_1$

$$\Psi_0(x) = N e^{-2 \frac{(x-x_0)^2}{\Delta x^2}} e^{ik_1 x}$$

Zodra we dit golfpakket in de buurt brengen van de barrière, verandert hij. Om uit te vinden hoe, dienen we het golfpakket te projecteren op de eigentoestanden van de barrière.

$$\begin{aligned} |\Psi_{b0}\rangle &= \langle \Psi_b | \Psi_0 \rangle |\Psi_b\rangle = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^* \Psi_b dx \right] |\Psi_b\rangle \\ &= a(k) |\Psi_b\rangle \end{aligned}$$

Een goed gekozen golfpakket is volledig links van de barrière gelokaliseerd. Dit betekent dat de integraal in vergelijking 9 alleen in regio I niet gelijk is aan nul. Verder gebruiken de eigenschap dat het inproduct tussen orthogonale fourier-componenten verdwijnt. Dit geeft de uitdrukking voor $a(k)$:

$$a(k) = \int_{-\infty}^{\infty} [e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}]^* \Psi_0(x) dx \quad (9)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0(x) e^{-ik_1 x} dx \quad (10)$$

$$= \tilde{\Psi}(k) \quad (11)$$

Het blijkt dat $a(k)$ niets meer of minder is dan de Fouriergetransformeerde van Ψ_0 . Een analytische uitdrukking hiervoor is beschikbaar en luidt:

$$\tilde{\Psi}(k) = N' e^{-\Delta x^2 \frac{(k-k_1)^2}{8}} e^{i(k-k_1)x_0} \quad (12)$$

We hebben nu een goede functie op $t=0$. Aangezien $|\Psi_{b0}\rangle$ een energie-eigenfunctie is, zal het tijdsverloop gaan zoals beschreven in vergelijking 4. Dit betekent dat voor $\Psi(x, t)$ geldt dat:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iEt/\hbar} |\Psi_{b0}\rangle dk = \int_{-\infty}^{\infty} a(k) \Psi_b(x) e^{-iEt/\hbar} dk \quad (13)$$

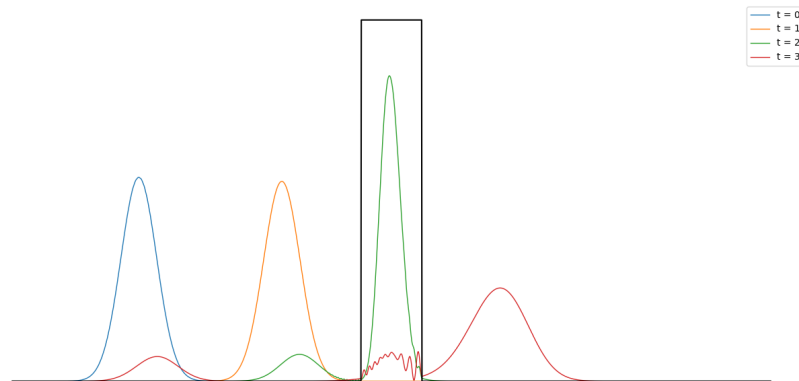
Let op: in vergelijking 13 zijn $a(k)$ en Ψ_b allen afhankelijk van k ! Zorg dat je alles omschrijft naar k .

Hoofdopdracht: implementeer vergelijking 13 in Python en maak een grafische weergave van het tijdsverloop van het golfpakket.

5 Resonantie

Als de halve golflengte van het golfpakket precies n keer in de potentiaalberg past, treedt er resonantie op in het systeem. Dit betekent dat er een reële kans is dat het deeltje zich in de potentiaalbarrière bevindt.

Bonusopdracht: vind de theoretische waarden van V_0 waarvoor er resonantie optreedt en controleer of dit overeenkomt met de simulatie.



Figuur 2: Een resonante toestand in de potentiaalbarrière.

Referenties

- [1] Eugen Merzbacher. Quantum mechanics. 1970. *John Wiler & Sons, New York Zbl0102, 42701(4)*, 1977.

6 Appendix 1

Voor het berekenen van de coëfficiënten op de randen van de barrière hebben we vier vergelijkingen:

$$\Psi_I(-a) = \Psi_{II}(-a) \quad (1)$$

$$\left. \frac{\partial \Psi_I}{\partial x} \right|_{x=-a} = \left. \frac{\partial \Psi_{II}}{\partial x} \right|_{x=-a} \quad (2)$$

$$\Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a) \quad (3)$$

$$\left. \frac{\partial \Psi_{II}}{\partial x} \right|_{x=a} = \left. \frac{\partial \Psi_{III}}{\partial x} \right|_{x=a} \quad (4)$$

Deze vergelijkingen invullen met de aanname in vergelijking 3 geeft:

$$e^{-ik_1 a} + Be^{ik_1 a} = Ce^{-ik_2 a} + De^{ik_2 a} \quad (a)$$

$$k_1 [e^{-ik_1 a} - Be^{ik_1 a}] = k_2 [Ce^{-ik_2 a} - De^{ik_2 a}] \quad (b)$$

$$Ce^{ik_2 a} + De^{-ik_2 a} = Fe^{ik_1 a} \quad (c)$$

$$k_2 [Ce^{ik_2 a} - De^{-ik_2 a}] = k_1 Fe^{ik_1 a} \quad (d)$$

Allereerst drukken we C en D uit in F. Hiervoor gebruiken we vergelijkingen (c) en (d)

$$(d) \rightarrow Ce^{ik_2 a} - De^{-ik_2 a} = \frac{k_1}{k_2} Fe^{ik_1 a} \quad (e)$$

$$(c + e) \rightarrow 2Ce^{ik_2 a} = \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) Fe^{ik_1 a} \quad (f)$$

$$(c - e) \rightarrow 2De^{-ik_2 a} = \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) Fe^{ik_1 a} \quad (g)$$

Dit gaan we nu gebruiken om een uitdrukking voor F te vinden. Allereerst schrijven we (b) om:

$$e^{-ik_1 a} - Be^{ik_1 a} = \frac{k_2}{k_1} [Ce^{-ik_2 a} - De^{ik_2 a}] \quad (h)$$

Nu schrijven we C vrij:

$$\begin{aligned}
(a + h) \rightarrow 2e^{-ik_1 a} &= \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) C e^{ik_2 a} + \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) D e^{ik_2 a} \\
C &= \frac{1}{1 + \frac{k_2}{k_1}} \left[2e^{-ik_1 a} - \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) D e^{ik_2 a} \right] e^{ik_2 a} \quad (i)
\end{aligned}$$

(i) invullen in (f):

$$\begin{aligned}
\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) F e^{ik_1 a} &= \frac{2}{1 + \frac{k_2}{k_1}} \left[2e^{-ik_1 a} - \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) D e^{ik_2 a} \right] \\
\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) F e^{ik_1 a} - \frac{4}{1 + \frac{k_2}{k_1}} e^{-ik_1 a} e^{2ik_2 a} &= -2D \frac{1 - \frac{k_2}{k_1}}{1 + \frac{k_2}{k_1}} e^{ik_2 a} e^{2ik_2 a} \\
-\frac{\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)}{1 - \frac{k_2}{k_1}} F e^{ik_1 a} e^{-3ik_2 a} + \frac{4}{1 + \frac{k_2}{k_1}} e^{-ik_1 a} e^{-ik_2 a} &= 2D \quad (j) \\
(g) \rightarrow \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) F e^{ik_1 a} e^{ik_2 a} &= 2D \quad (k)
\end{aligned}$$

Nu zijn we zover dat we F kunnen uitrekenen.

$$\begin{aligned}
(j - k) \rightarrow F &= \left(\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{ik_2 a} + \frac{\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)}{1 - \frac{k_2}{k_1}} e^{-3ik_2 a} \right) = \frac{4}{1 - \frac{k_2}{k_1}} e^{-2ik_1 a} e^{-ik_2 a} \\
F &= \frac{4e^{-2ik_1 a}}{\left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) \left(\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{2ik_2 a} + \frac{\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)}{1 - \frac{k_2}{k_1}} e^{-2ik_2 a} \right)} \\
&= \frac{4e^{-2ik_1 a}}{\left(1 - \frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} + 1\right) e^{2ik_2 a} + \left(1 + \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} + 1\right) e^{-2ik_2 a}}
\end{aligned}$$

Als we stellen dat $\eta \equiv \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1}$, dan krijgen we:

$$\begin{aligned}
F &= \frac{4e^{-2ik_1 a}}{(2 - \eta) e^{2ik_2 a} + (2 + \eta) e^{-2ik_2 a}} \\
&= \frac{e^{-2ik_1 a}}{\cos(2k_2 a) - \frac{i\eta}{2} \sin(2k_2 a)}
\end{aligned}$$

Hoezee! Nu we de eerste coëfficiënt hebben gevonden, kunnen we de eerder gevonden relaties gebruiken om C, D en B uit te drukken in termen van F.

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

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

Nu rest ons alleen nog coëfficiënt B.

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

Als we hierin de eerder gevonden waarden voor C en D invullen, geeft dit:

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{4}F \left[\left(\frac{k_1 - k_2}{k_1}\right) \left(\frac{k_1 + k_2}{k_2}\right) e^{-2ik_2a} + \left(\frac{k_2 - k_1}{k_2}\right) \left(\frac{k_1 + k_2}{k_1}\right) e^{2ik_2a} \right] \\ &= \frac{1}{4}F \left[\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1k_2} e^{-2ik_2a} - \frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1k_2} e^{2ik_2a} \right] \\ &= F \cdot i \frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1k_2} \sin(2k_2a) \end{aligned}$$

Mijn dank voor uw aandacht.