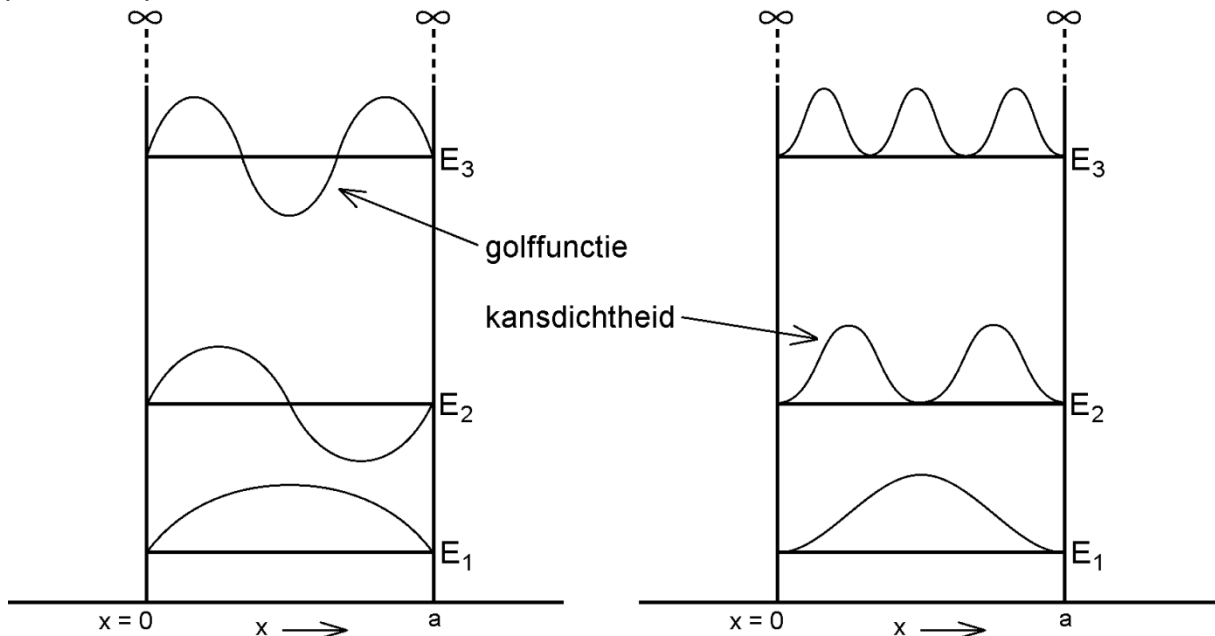


Voorbeeld 1: Oneindig diepe potentiaalput

In de onderstaande figuren bevindt zich een deeltje in een eendimensionale ruimte tussen $x = 0$ en $x = a$. Binnen dat gebied is de potentiële energie E_P van het deeltje nul; daarbuiten is hij oneindig groot. Je zou kunnen zeggen dat zich op $x = 0$ en $x = a$ ondoordringbare wanden bevinden. We spreken van een oneindig diepe potentiaalput.



In de onderstaande beschouwing is de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking ons uitgangspunt (vergelijking 1).

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E_P(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (\text{vgl. 1})$$

In de put kan vergelijking 1 vereenvoudigd worden tot vergelijking 2.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E \cdot \psi(x) \quad (\text{vgl. 2})$$

De oplossing hiervan is

$$\psi(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \quad (\text{vgl. 3})$$

Uit de substitutie van vergelijking 3 in vergelijking 2 volgt:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \quad (\text{vgl. 4})$$

Samen met $p = \hbar \cdot k$ herkennen we hierin de klassieke vergelijking: $\frac{p^2}{2m} = E$.

Aan de linkerkant van de potentiaalput (dus voor $x < 0$) is de potentiële energie oneindig groot. Hieruit volgt dat $\Psi(0) = 0$ en dus dat $A = -B$. Vergelijking 3 wordt daarmee:

$$\psi(x) = 2iA \cdot \sin(kx) \quad (\text{vgl. 5})$$

Om dezelfde reden moet aan de rechterkant van de potentiaalput de golf functie Ψ ook nul worden. Dus $\Psi(a) = 0$. Hieruit volgt voor de mogelijke waarden van k :

$$k = n \cdot \frac{\pi}{a} \quad \text{met } n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{vgl. 6})$$

Uit de vergelijkingen 5 en 6 volgt dat voor de mogelijke golf functies $\Psi_n(x)$ geldt (met $C = \text{constante}$):

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

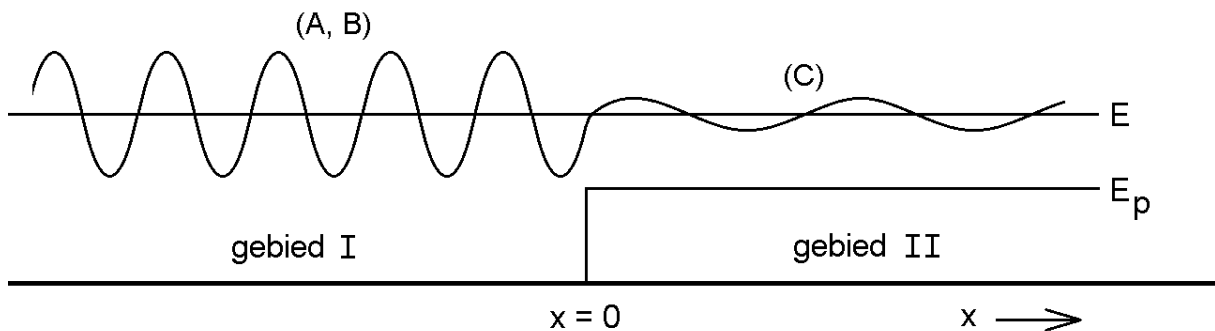
Uit de vergelijkingen 4 en 6 volgt dat er slechts bepaalde (kinetische) energiewaarden E van het deeltje mogelijk zijn, namelijk:

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

In de bovenstaande figuren zijn de eerste drie energiewaarden (E_1 , E_2 en E_3) in verticale richting uitgezet. In de linker figuur zijn de bijbehorende golf functies getekend; in de rechter figuur de bijbehorende kansdichtheden om het deeltje op plaats x aan te treffen.

Voorbeeld 2: Potentiaalsprong

In de onderstaande figuur bevindt een van links komend deeltje met energie E zich in een eendimensionale ruimte. Hierin zijn twee gebieden I en II te onderscheiden. In gebied I (waarvoor geldt $x < 0$) is de potentiële energie van het deeltje nul. In gebied II (waarvoor geldt $x > 0$) is de potentiële energie groter dan nul en met E_p aangegeven. De (totale) energie E van het deeltje is groter dan E_p . In de figuur, waarin de energie verticaal staat uitgezet, is de horizontale lijn die hoort bij E daarom hoger getekend dan de lijn die hoort bij E_p .



In de klassieke mechanica zal het deeltje in gebied II met een lagere snelheid naar rechts bewegen. Het is uitgesloten dat het deeltje bij de overgang van gebied I naar gebied II van richting omkeert. Zoals we zullen zien, geldt dit niet in de quantummechanica. In de onderstaande beschouwing is de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking ons uitgangspunt (vergelijking 1).

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E_p(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (\text{vgl. 1})$$

In gebied I kan vergelijking 1 vereenvoudigd worden tot vergelijking 2.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E \cdot \psi(x) \quad (\text{vgl. 2})$$

De oplossing hiervan is

$$\psi(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \quad (\text{vgl. 3})$$

De eerste term stelt een naar rechts bewegende golf voor; de tweede term een naar links bewegende golf. Deze laatste golf vertegenwoordigt het teruggekaatste deeltje. De waarde van k in vergelijking 3 vinden we door deze in vergelijking 2 te substitueren. Hieruit volgt:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E.$$

Samen met $p = \hbar \cdot k$ herkennen we hierin de klassieke vergelijking: $\frac{p^2}{2m} = E.$

In gebied II kunnen we vergelijking 1 schrijven als:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (E - E_p) \cdot \psi(x) \quad (\text{vgl. 4})$$

De oplossing hiervan is (ervan uitgaande dat het deeltje in gebied II niet naar links beweegt)

$$\psi(x) = C \cdot e^{ik'x} \quad (\text{vgl. 5})$$

Substitutie van vergelijking 5 in vergelijking 4 geeft:

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = E - E_p.$$

Uiteraard herkennen we hierin weer de klassieke vergelijking $\frac{p^2}{2m} = E - E_p$.

We eisen nu dat $\Psi(x)$ en $d\Psi(x)/dx$ continu zijn bij $x = 0$. Uit de vergelijkingen 3 en 5 volgen dan:

$$A + B = C \quad \text{en} \quad k \cdot A - k' \cdot B = k' \cdot C$$

Hieruit volgen:

$$B/A = (k - k')/(k + k') \quad \text{en} \quad C/A = 2k/(k + k')$$

Uit het feit dat B niet nul is, volgt dat er een kans is dat het deeltje terugkaatst bij de potentiaalsprong.

Voor de reflectiecoëfficiënt R geldt:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2$$

In de bovenste helft van de figuur is een impressie van de golffunctie $\Psi(x)$ gegeven ofschoon dat eigenlijk onmogelijk is omdat Ψ een complexe functie is. Toch geeft de figuur duidelijk weer dat de golflengte in gebied I kleiner is dan in gebied II.

Wiskundig volgt dit uit de bovenstaande berekening omdat k (= golfgetal in gebied I) groter is dan k' (= golfgetal in gebied II). Het is ook in overeenstemming met de klassieke mechanica omdat de impuls van het deeltje in gebied I groter is dan in gebied II. Volgens $p = h / \lambda$ is de golflengte in gebied I dan juist kleiner.

Opmerking

Tot nu toe hebben we alleen naar de plaatsafhankelijke golffunctie $\Psi(x)$ gekeken.

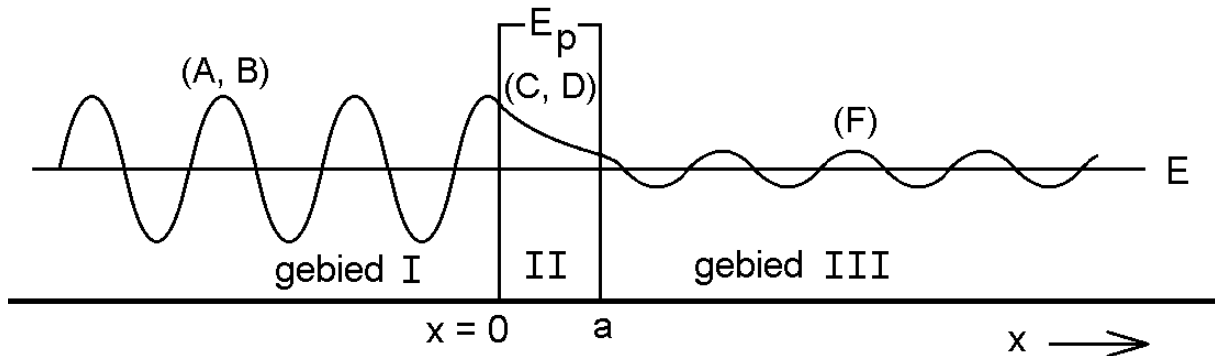
Voor de plaats- en tijdafhankelijke golffunctie $\Psi(x,t)$ geldt:

$$\psi(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

De e-macht levert een fasedraaiing van de golffunctie maar heeft geen invloed op de kansdichtheid om het deeltje ergens aan te treffen.

Voorbeeld 3: Tunneleffect

In de onderstaande figuur bevindt zich een van links komend deeltje in een eendimensionale ruimte. In de gebieden I en III is de potentiële energie van het deeltje nul. Gebied II (tussen $x = 0$ en $x = a$) is een potentiaalbarrière met een potentiële energie E_p die groter is dan de energie E van het deeltje. Verticaal staat de energie uitgezet.



Volgens de klassieke mechanica zal het deeltje de potentiaalbarrière niet kunnen passeren. Zoals we zullen zien, is dit volgens de quantummechanica wel mogelijk. Dit wordt het tunneleffect genoemd. Het uitgangspunt is weer de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking.

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

In de gebieden I en III kan deze vergelijking vereenvoudigd worden tot:

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

In gebied I is de oplossing hiervan:

$$\psi(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \quad (\text{vgl. 1}).$$

De eerste term van het rechterlid hoort bij een naar rechts bewegende golf en de tweede term hoort bij een door de potentiaalbarrière teruggekaatste golf.

In gebied III is de oplossing:

$$\psi(x) = F \cdot e^{ikx} \quad (\text{vgl. 2})$$

Bedenk hierbij dat, als het deeltje de barrière zou passeren (wat klassiek onmogelijk is), we alleen te maken hebben met een naar rechts lopende golf.

In vergelijking 1 en 2 geldt voor k :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$$

Hieruit volgt:

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (\text{vgl. 3})$$

In gebied II kan de Schrödingervergelijking geschreven worden als:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (E_P - E) \cdot \psi(x)$$

In dit gebied (II) is de oplossing:

$$\psi(x) = C \cdot e^{\theta x} + D \cdot e^{-\theta x} \quad (\text{vgl. 4})$$

In deze vergelijking geldt voor θ :

$$\frac{\hbar^2 \theta^2}{2m} = E_P - E.$$

Hieruit volgt:

$$\theta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \cdot (E_P - E)} \quad (\text{vgl. 5})$$

We eisen dat $\Psi(x)$ en $d\Psi(x)/dx$ continu zijn bij $x = 0$ en $x = a$. Hieruit volgen vier vergelijkingen, namelijk:

$$A + B = C + D \quad (\text{vgl. 6})$$

$$ik \cdot A - ik \cdot B = \theta \cdot C - \theta \cdot D \quad (\text{vgl. 7})$$

$$C \cdot e^{\theta a} + D \cdot e^{-\theta a} = F \cdot e^{ika} \quad (\text{vgl. 8})$$

$$\theta \cdot C \cdot e^{\theta a} - \theta \cdot D \cdot e^{-\theta a} = ik \cdot F \cdot e^{ika} \quad (\text{vgl. 9})$$

Uit de laatste vier vergelijkingen kunnen we de transmissiecoëfficiënt $T = |F|^2 / |A|^2$ berekenen. Zie hiervoor de bijlage. Het resultaat is:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{E_P^2}{4E(E_P - E)} \sinh^2\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E_P - E)}\right)}$$

Als E_P veel groter is dan E en het argument van de sinushyperbolicus (dit is θa) veel groter is dan 1, kan deze uitdrukking vereenvoudigd worden tot:

$$T = \frac{16 \cdot E}{E_P} \cdot e^{-\left(\frac{a}{\hbar}\right) \sqrt{8m(E_P - E)}}$$

Bijlage bij het tunneleffect

We gaan uit van de volgende vier vergelijkingen.

$$A + B = C + D \quad (\text{vgl. 6})$$

$$ik \cdot A - ik \cdot B = \theta \cdot C - \theta \cdot D \quad (\text{vgl. 7})$$

$$C \cdot e^{\theta a} + D \cdot e^{-\theta a} = F \cdot e^{ika} \quad (\text{vgl. 8})$$

$$\theta \cdot C \cdot e^{\theta a} - \theta \cdot D \cdot e^{-\theta a} = ik \cdot F \cdot e^{ika} \quad (\text{vgl. 9})$$

We willen de transmissiecoëfficiënt $T = |F|^2 / |A|^2$ berekenen. Dit gebeurt in de volgende vier stappen.

Stap 1: Uit vergelijkingen 6 en 7 vinden we een uitdrukking van A in C en D.

Stap 2: Uit vergelijkingen 8 en 9 vinden we een uitdrukking van C en D in F.

Stap 3: Met de voorgaande twee stappen drukken we A in F uit.

Stap 4: We berekenen van A / F het kwadraat van de modulus.

Stap 5: We substitueren de vergelijkingen 3 en 5 in het resultaat van stap 4.

Stap 1

Vergelijking 6 vermenigvuldigen met $i \cdot k$ en deze vervolgens optellen bij vergelijking 7 geeft:

$$2ik \cdot A = (ik + \theta) \cdot C + (ik - \theta) \cdot D$$

Dit wordt:

$$A = \frac{1}{2ik} [(ik + \theta) \cdot C + (ik - \theta) \cdot D] \quad (\text{vgl. 10})$$

Stap 2

Vergelijking 8 vermenigvuldigen met θ en deze vervolgens optellen bij vergelijking 9 geeft:

$$2 \cdot \theta \cdot C \cdot e^{\theta a} = (\theta + ik) \cdot F \cdot e^{ika}$$

Hieruit volgt:

$$C = \frac{\theta + ik}{2\theta} \cdot F \cdot e^{ika - \theta a} \quad (\text{vgl. 11})$$

Vergelijking 8 vermenigvuldigen met θ en vervolgens hiervan vergelijking 9 aftrekken geeft:

$$2 \cdot \theta \cdot D \cdot e^{-\theta a} = (\theta - ik) \cdot F \cdot e^{ika}$$

Hieruit volgt:

$$D = \frac{\theta - ik}{2\theta} F \cdot e^{ika + \theta a} \quad (\text{vgl. 12})$$

Stap 3

Als we de vergelijking 11 in 12 in vergelijking 10 substitueren, krijgen we:

$$A = \frac{1}{4ik\theta} \left[(\theta + ik)^2 \cdot e^{ika-\theta a} - (\theta - ik)^2 \cdot e^{ika+\theta a} \right] \cdot F$$

Dit geeft:

$$A = \frac{e^{ika}}{4ik\theta} \left[(\theta + ik)^2 \cdot e^{-\theta a} - (\theta - ik)^2 \cdot e^{+\theta a} \right] \cdot F$$

Dit geeft:

$$A = \frac{e^{ika}}{4ik\theta} \left[(\theta^2 - k^2 + 2ik\theta) \cdot e^{-\theta a} - (\theta^2 - k^2 - 2ik\theta) \cdot e^{+\theta a} \right] \cdot F$$

Dit geeft:

$$A = \frac{e^{ika}}{4ik\theta} \left[(k^2 - \theta^2 + 2ik\theta) \cdot e^{+\theta a} - (k^2 - \theta^2 - 2ik\theta) \cdot e^{-\theta a} \right] \cdot F$$

Dit geeft:

$$A = \frac{e^{ika}}{4ik\theta} \left[(k^2 - \theta^2) \cdot 2 \sinh(\theta a) + 2ik\theta \cdot 2 \cosh(\theta a) \right] \cdot F$$

Dit geeft:

$$A = \frac{e^{ika}}{2ik\theta} \left[(k^2 - \theta^2) \sinh(\theta a) + 2ik\theta \cosh(\theta a) \right] \cdot F \quad (\text{vgl. 13})$$

Stap 4

Uit vergelijking 13 volgt:

$$\left| \frac{A}{F} \right|^2 = \frac{1}{4k^2\theta^2} \left[(k^2 - \theta^2)^2 \sinh^2(\theta a) + 4k^2\theta^2 \cosh^2(\theta a) \right]$$

Met $\cosh^2(x) = 1 + \sinh^2(x)$ geeft dit:

$$\left| \frac{A}{F} \right|^2 = \frac{1}{4k^2\theta^2} \left[(k^4 - 2k^2\theta^2 + \theta^4 + 4k^2\theta^2) \sinh^2(\theta a) + 4k^2\theta^2 \right]$$

Dit geeft:

$$\left| \frac{A}{F} \right|^2 = \frac{1}{4k^2\theta^2} \left[(k^4 + 2k^2\theta^2 + \theta^4) \sinh^2(\theta a) + 4k^2\theta^2 \right]$$

Dit geeft:

$$\left| \frac{A}{F} \right|^2 = 1 + \frac{k^4 + 2k^2\theta^2 + \theta^4}{4k^2\theta^2} \sinh^2(\theta a) \quad (\text{vgl. 14})$$

Stap 5

Substitutie van vergelijkingen 3 en 5 in de factor voor \sinh^2 in de laatste vergelijking geeft.

$$\frac{k^4 + 2k^2\theta^2 + \theta^4}{4k^2\theta^2} = \frac{E^2 + 2E \cdot (E_p - E) + (E_p - E)^2}{4E(E_p - E)} = \frac{E_p^2}{4E(E_p - E)}$$

Voor de transmissiecoëfficiënt $T = |F|^2 / |A|^2$ geldt dan:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{E_p^2}{4E(E_p - E)} \sinh^2\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E_p - E)}\right)}$$