Mit den Anschlussbedingungen folgt dann dass eine solche Lösung nicht normierbar ist.

$$\Rightarrow \quad -V_0 < E < 0$$

Lösung der Schrödinger-Gl. in Gebieten A–C:

A : $\psi'' = \varkappa^2 \psi \quad \Rightarrow \quad \psi_A(x) = \alpha_+ e^{\varkappa x} + \alpha_- e^{-\varkappa x}$

Normierbarkeit : $\alpha_- = 0$, sonst $\lim_{x \to -\infty} \psi_A = \infty$

$$\Rightarrow \quad \underline{\psi_A(x) = \alpha_+ e^{\varkappa x}}$$

C : analog zu A ; $\gamma_+ = 0$ (Normierung)

$$\underline{\psi_C(x) = \gamma_- e^{-\varkappa x}}$$

B : $\psi'' = -k^2 \psi \quad \Rightarrow \quad \underline{\psi_B(x) = \beta_+ e^{ikx} + \beta_- e^{-ikx}}$

Benutze Anschlussbedingungen bei $x = \pm L/2$

$\psi_A(-\frac{L}{2}) = \psi_B(-\frac{L}{2})$: $\quad \alpha_+ e^{-\varkappa \frac{L}{2}} = \beta_+ e^{-ik\frac{L}{2}} + \beta_- e^{ik\frac{L}{2}} \qquad (1)$

$\psi_B(\frac{L}{2}) = \psi_C(\frac{L}{2})$: $\quad \gamma_- e^{-\varkappa \frac{L}{2}} = \beta_- e^{-ik\frac{L}{2}} + \beta_+ e^{ik\frac{L}{2}} \qquad (2)$

$\psi_A'(-\frac{L}{2}) = \psi_B'(-\frac{L}{2})$: $\quad \varkappa \alpha_+ e^{-\varkappa \frac{L}{2}} = ik\left(\beta_+ e^{-ik\frac{L}{2}} - \beta_- e^{ik\frac{L}{2}}\right) \qquad (3)$

$\psi_B'(\frac{L}{2}) = \psi_C'(\frac{L}{2})$: $\quad -\varkappa \gamma_- e^{-\varkappa \frac{L}{2}} = -ik\left(\beta_- e^{-ik\frac{L}{2}} - \beta_+ e^{ik\frac{L}{2}}\right) \qquad (4)$

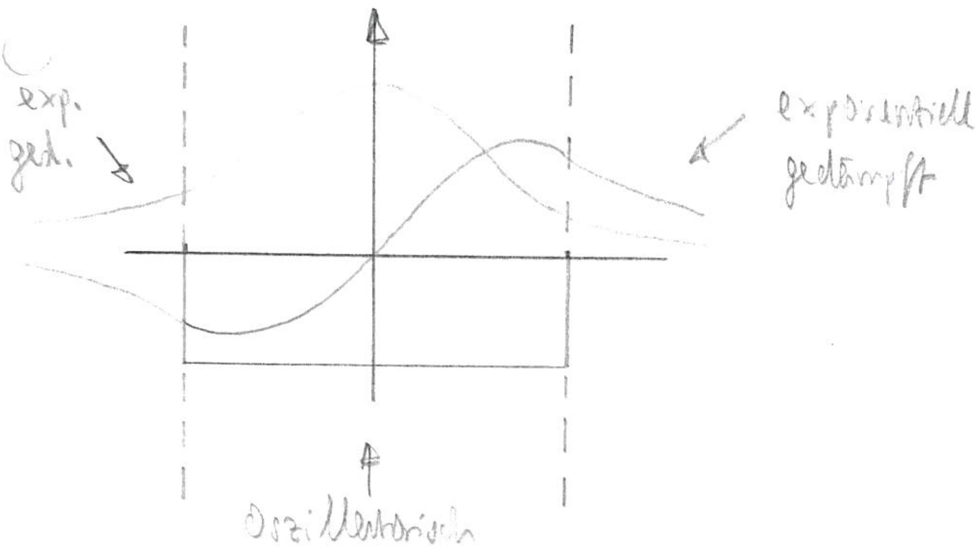
↪ 4 Gleichungen für Unbekannte $\alpha_+, \beta_+, \beta_-, \gamma_-$
Formale Lösung möglich aber umständlich.

Problem ist symmetrisch um $x = 0$

$\psi(x)$ ist Lösung $\Rightarrow$ $\chi(x) = \psi(-x)$ ist auch Lösung

$\Rightarrow$ $\psi_g(x) = \psi(x) + \chi(x)$ symmetrische Lösung

$\psi_u(x) = \psi(x) - \chi(x)$ antisymmetrische Lösung



Symmetrische Lösung: $\psi_g(x) = \psi_g(-x)$ impliziert

$$\alpha_+ = \gamma_- \equiv \alpha \quad , \quad \beta_+ = \beta_- \equiv \beta$$

↪ muss nur 2 Koeffizienten α, β bestimmen.

$$(1) \Rightarrow \quad \alpha e^{-\varkappa L/2} = 2\beta \cos\left(k \tfrac{L}{2}\right) \qquad (1')$$

$$(3) \Rightarrow \quad \varkappa \alpha e^{-\varkappa L/2} = 2k\beta \sin\left(k \tfrac{L}{2}\right) \qquad (3')$$

$$\frac{(3')}{(1')} \Rightarrow \quad \boxed{\varkappa = k \tan\left(k \tfrac{L}{2}\right)} \qquad (*)$$

Die Lösungen von (*) ergeben die Wellenzahlen $\varkappa$ und k und somit auch die Energien in den Gebieten A – C für die symmetrische Wellenfunktion.

$$\varkappa \frac{L}{2} = k \frac{L}{2} \tan\left(k \frac{L}{2}\right) \Leftrightarrow \quad \underline{\eta = \xi \tan \xi}$$

Lösungen dieser transzendenten Gleichung lassen sich numerisch oder grafisch bestimmen (siehe unten).

Falls die Lösungen $\varkappa$ und k von (*) bekannt sind, lassen sich die Koeffizienten α und β bestimmen

Aus (1') folgt

$$\beta = \alpha \frac{e^{-\varkappa L/2}}{2\cos\left(k \frac{L}{2}\right)}$$

und aus (*) erhält man

$$\frac{\varkappa^2}{k^2} = \frac{\sin^2\left(k\frac{L}{2}\right)}{\cos^2\left(k\frac{L}{2}\right)} = \frac{1-\cos^2(\ldots)}{\cos^2(\ldots)} = \frac{1}{\cos^2\left(k\frac{L}{2}\right)} - 1$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\cos\left(k\frac{L}{2}\right)} = \left(1 + \frac{\varkappa^2}{k^2}\right)^{1/2} \qquad [\text{II}]$$

und daher

$$\underline{\beta = \alpha \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\varkappa^2}{k^2}\right)^{1/2} e^{-\varkappa \frac{L}{2}}}$$

Bestimme α aus der Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \underbrace{\int_{-\infty}^{-L/2} |\psi_A|^2 dx}_{I_A} + \underbrace{\int_{-L/2}^{L/2} |\psi_B|^2 dx}_{I_B} + \underbrace{\int_{L/2}^{\infty} |\psi_C|^2 dx}_{I_C}$$

$$I_A = \int_{-\infty}^{-L/2} \alpha^2 e^{2\varkappa x} dx = \frac{\alpha^2}{2\varkappa} e^{2\varkappa x}\Big|_{-\infty}^{-L/2} = \frac{\alpha^2}{2\varkappa} e^{-\varkappa L}$$

$$I_C = \int_{L/2}^{\infty} \alpha^2 e^{-2\varkappa x} dx \underset{x\to -x}{=} -\int_{-L/2}^{-\infty} \alpha^2 e^{2\varkappa x} dx = I_A$$

$$\psi_B = 2\beta \cos(kx)$$

$$\int \cos^2 nx = \frac{1}{2}\left(x + \frac{\sin(nx)\cos(nx)}{n}\right) = \frac{1}{2}\left(x + \frac{\sin(2nx)}{2n}\right)$$

$$I_B = 4\beta^2 \int_{-L/2}^{L/2} \cos^2(kx)\, dx$$

$$= 2\beta^2 \left(L + \frac{2}{k}\sin\left(k\frac{L}{2}\right)\cos\left(k\frac{L}{2}\right)\right)$$

$$\beta = \frac{\alpha}{2}\left(1 + \frac{\varkappa^2}{k^2}\right)^{1/2} e^{-\varkappa \frac{L}{2}}$$

$$= \frac{\alpha^2}{2}\left(1 + \frac{\varkappa^2}{k^2}\right) e^{-\varkappa L}\left(L + \frac{2}{k}\sin\left(k\frac{L}{2}\right)\cos\left(k\frac{L}{2}\right)\right)$$

$$I_A + I_B + I_C = 1$$

$$\Leftrightarrow$$

$$1 = \alpha^2 e^{-\varkappa L}\left\{\frac{1}{\varkappa} + \left(1 + \frac{\varkappa^2}{k^2}\right)\left[\frac{L}{2} + \frac{1}{k}\sin\left(k\frac{L}{2}\right)\cos\left(k\frac{L}{2}\right)\right]\right\}$$

(*): $\varkappa = k\tan\left(k\frac{L}{2}\right) \Rightarrow \frac{1}{\varkappa}\frac{\sin(k\frac{L}{2})}{\cos(k\frac{L}{2})} = \frac{1}{k}$

$$1 = \alpha^2 e^{-\varkappa L} \left\{ \frac{1}{\varkappa} + \left(1 + \frac{\varkappa^2}{k^2}\right)\left(\frac{L}{2} + \frac{1}{\varkappa} \sin^2\left(k\frac{L}{2}\right)\right)\right\}$$

$$= \alpha^2 e^{-\varkappa L} \left\{ \frac{1}{\varkappa}\left[1 + \left(1+\frac{\varkappa^2}{k^2}\right) \sin^2\left(k\frac{L}{2}\right)\right] + \left(1+\frac{\varkappa^2}{k^2}\right)\frac{L}{2} \right\}$$

$$= \alpha^2 e^{-\varkappa L} \left\{ \frac{1}{\varkappa}\left[1 + \left(1+\frac{\varkappa^2}{k^2}\right) \left(1 - \cos^2\left(k\frac{L}{2}\right)\right)\right] + \left(1+\frac{\varkappa^2}{k^2}\right)\frac{L}{2} \right\}$$

$$= \alpha^2 e^{-\varkappa L} \left\{ \frac{1}{\varkappa}\left[\cancel{1+} \left(1+\frac{\varkappa^2}{k^2}\right) \cancel{- \underbrace{\left(1+\frac{\varkappa^2}{k^2}\right) \cos^2\left(k\frac{L}{2}\right)}_{=1\ [*]}}\right] + \left(1+\frac{\varkappa^2}{k^2}\right)\frac{L}{2} \right\}$$

$$= \alpha^2 e^{-\varkappa L} \left(1+\frac{\varkappa^2}{k^2}\right)\left(\frac{1}{\varkappa} + \frac{L}{2}\right)$$

$$\therefore \quad \boxed{\frac{1}{\alpha} = e^{-\varkappa \frac{L}{2}} \sqrt{\left(1+\frac{\varkappa^2}{k^2}\right)\left(\frac{1}{\varkappa} + \frac{L}{2}\right)}}$$

(soviel zur symmetrischen Lösung...)

Antisymmetrische Lösung: $\psi_n(x) = -\psi_n(-x)$

$$\alpha_+ = -\gamma_- \equiv a, \qquad \beta_+ = -\beta_- \equiv b$$

$$(1) \Rightarrow \quad a\, e^{-\varkappa \frac{L}{2}} = -2ib \sin\left(k\frac{L}{2}\right) \qquad (1'')$$

$$(3) \Rightarrow \quad \varkappa a\, e^{-\varkappa \frac{L}{2}} = 2ibk \cos\left(k\frac{L}{2}\right) \qquad (3'')$$

$$\frac{(3'')}{(1'')} \Rightarrow \quad \boxed{\varkappa = -k \cot\left(k\frac{L}{2}\right)} \qquad (**)$$

(**) $\therefore$ $\boxed{\eta = -\xi \cot \xi}$ Transzendente Gleichung für die antisymmetrische Lösung

Aus (1'') folgt

$$b = a\, i \, \frac{e^{-\varkappa \frac{L}{2}}}{2 \sin(k \frac{L}{2})}$$

und aus (**) erhält man

$$\frac{\varkappa^2}{k^2} = \frac{\cos^2(k\frac{L}{2})}{\sin^2(k\frac{L}{2})} = \frac{1}{\sin^2(k\frac{L}{2})} - 1$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sin(k\frac{L}{2})} = \left(1 + \frac{\varkappa^2}{k^2}\right)^{1/2}$$

und daher

$$\boxed{b = a\, i\, \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\varkappa^2}{k^2}\right)^{1/2} e^{-\varkappa \frac{L}{2}}}$$

Aus der Normierungsbedingung folgt

$$\boxed{\frac{1}{a} = e^{-\varkappa \frac{L}{2}} \sqrt{\left(1 + \frac{\varkappa^2}{k^2}\right)\left(\frac{1}{\varkappa} + \frac{L}{2}\right)}}$$

$\leadsto$ $\left.\begin{matrix}\alpha, \beta \\ a, b\end{matrix}\right\}$ für $\left\{\begin{matrix}\text{symmetrische} \\ \text{anti-symmetrische}\end{matrix}\right\}$ Lösung

Lösungen der transzendenten Gleichungen:

$$\eta = \xi \tan \xi \quad , \quad \eta = -\xi \cot \xi$$

$$\eta = \varkappa \frac{L}{2} \quad , \quad \xi = k \frac{L}{2}$$

$$\varkappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \quad , \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)$$

$$\Rightarrow \quad \eta^2 + \xi^2 = \left(\frac{L}{2}\right)^2 \frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0-E)$$

$$= \left(\frac{L}{2}\right)^2 \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \equiv R^2 > 0$$

$\Rightarrow$ Für vorgegebenes V_0 und L liegen ξ, η auf einem Kreis

$\longrightarrow$ Grafische Lösung (Plot)

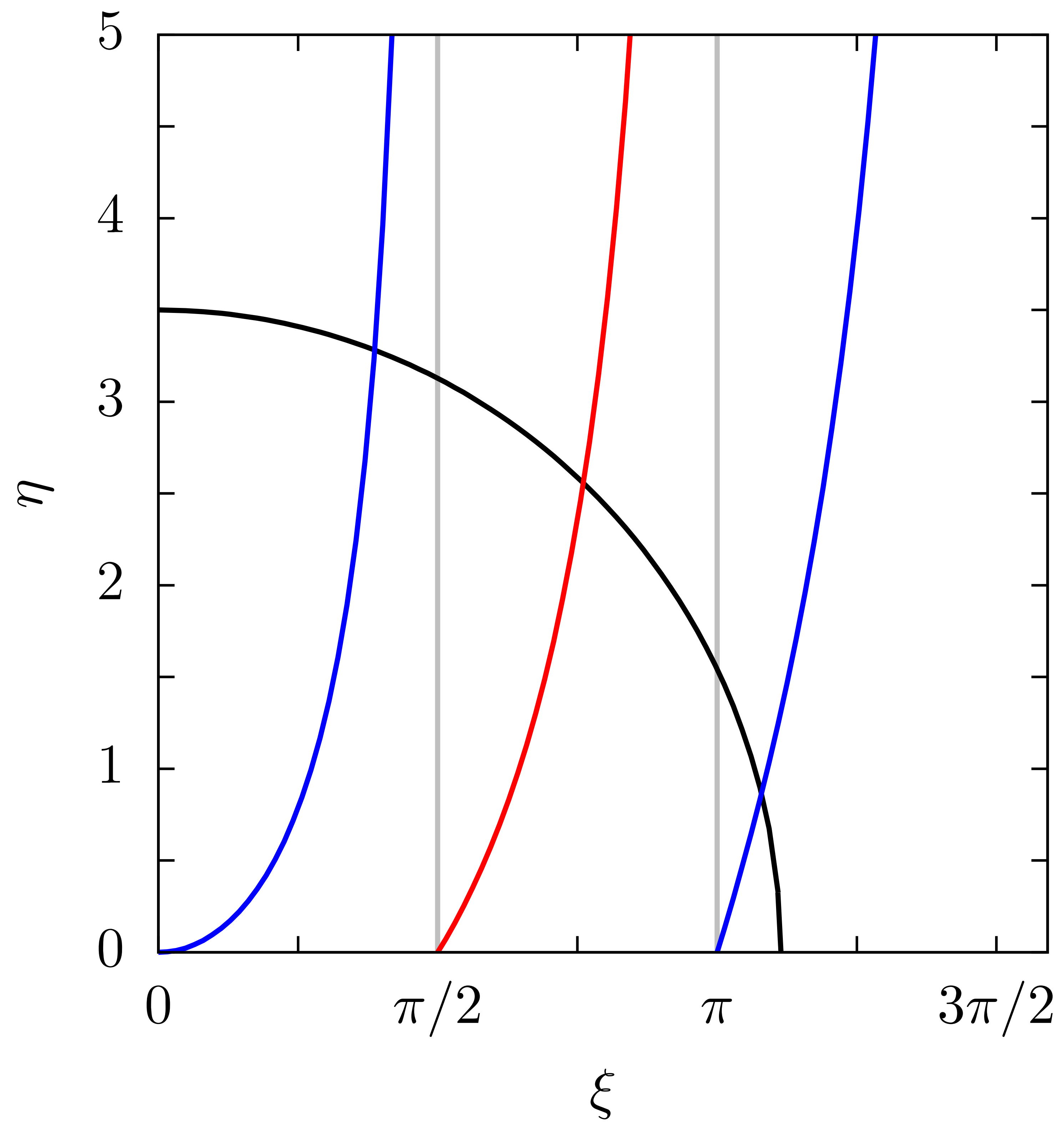
Man findet:

- Es gibt mindestens eine symmetrische Lösung
- Für endliches R gibt es nur endlich viele Lösungen mit $E < 0$.
- Energie ist gegeben durch

$$E = -\frac{\hbar^2 \varkappa^2}{2m} = -\eta^2 \cancel{\left(\frac{2}{L}\right)^2} \cancel{\left(\frac{L}{2}\right)^2} \frac{V_0}{R^2} = -\eta^2 \frac{V_0}{R^2}$$

$\longrightarrow$ Plot der Wellenfunktionen

Grafische Lösung



$\eta = \xi \tan \xi$ $\qquad$ $\eta = -\xi \cot \xi$

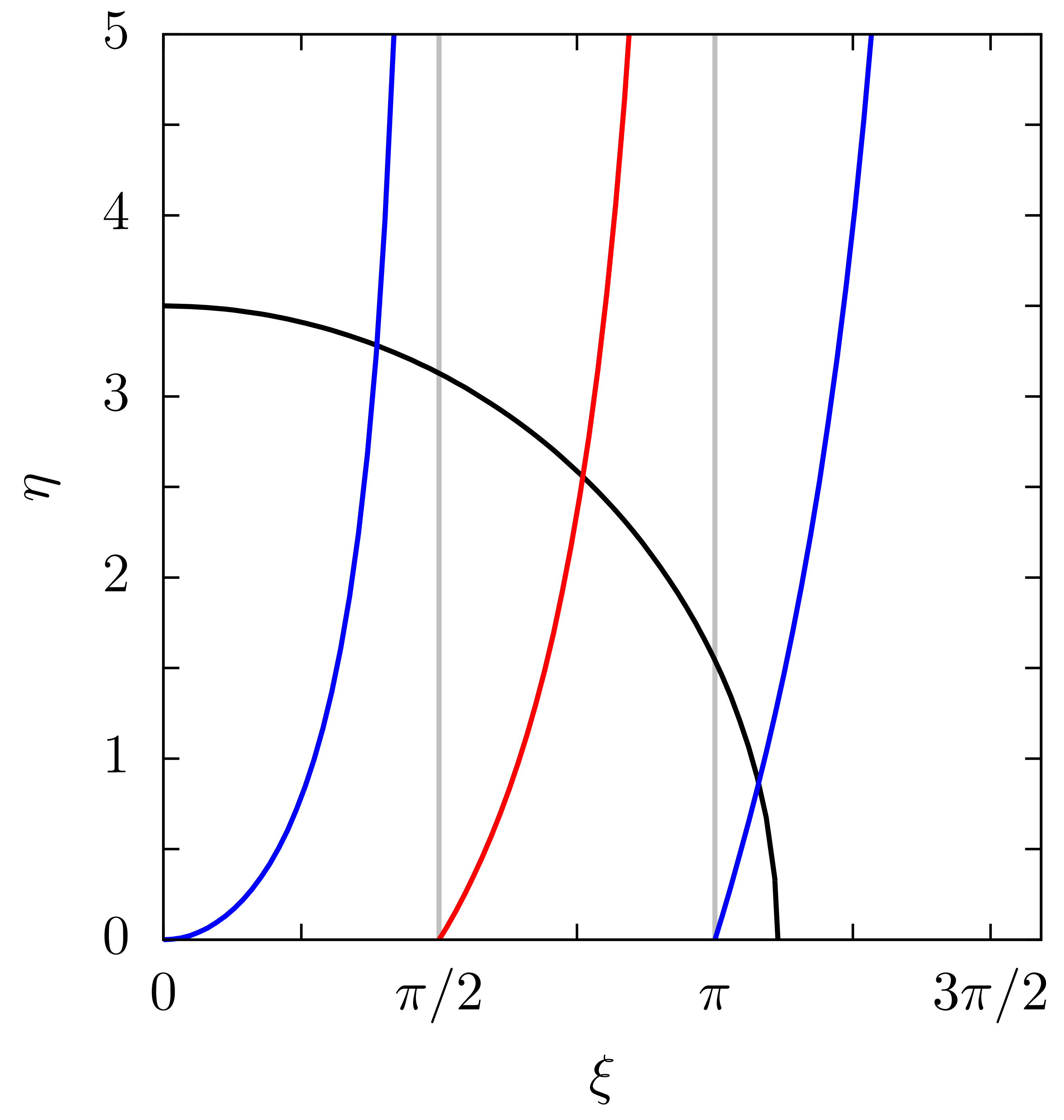
$$\eta^2 + \xi^2 = \left(\frac{L}{2}\right)^2 \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \equiv R^2$$

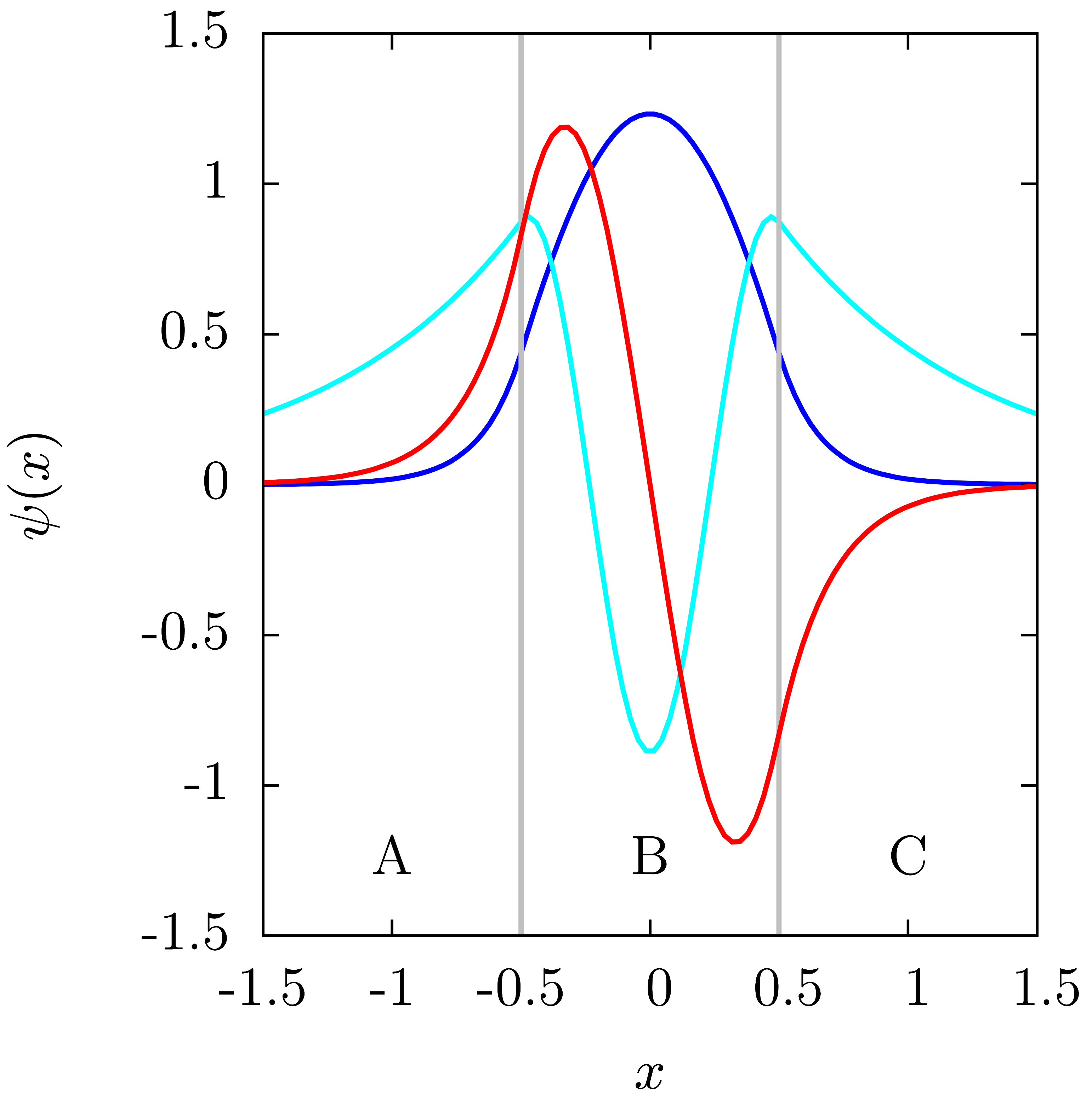
- Es gibt mindestens eine symmetrische Lösung
- Für endliches $R = \sqrt{\eta^2 + \xi^2}$ gibt es nur endlich viele Lösungen mit $E < 0$

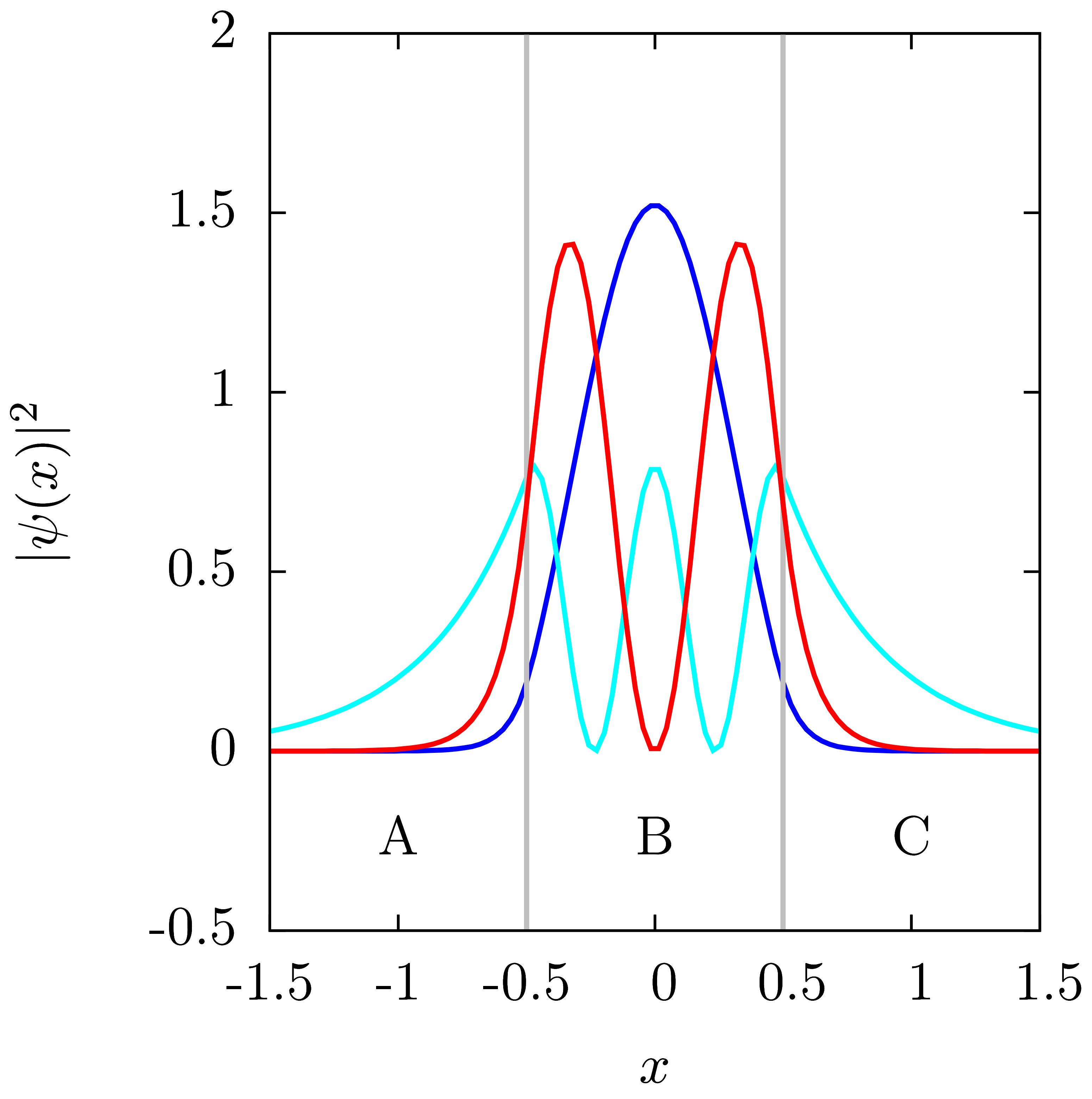
Numerische Werte: bestimme Nullstellen von

$$f(\xi) = \sqrt{R^2 - \xi^2} - \xi \tan \xi$$

Grafische Lösung







$\eta = \xi \tan \xi$ $\qquad$ $\eta = -\xi \cot \xi$

$$\eta^2 + \xi^2 = \left(\frac{L}{2}\right)^2 \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \equiv R^2$$

Für einen endlichen Potenzialtopf verschwindet die Wellenfunktion nicht im klassisch verbotenen Bereich!

Es gibt eine nicht-verschwindende Wahrscheinlichkeit ein Teilchen im klass. verb. Bereich anzutreffen, die exponentiell abfällt.

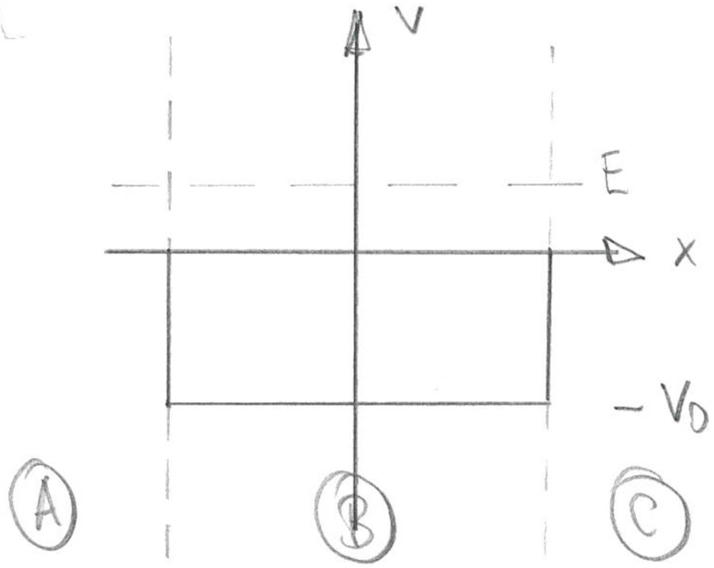
Eindringtiefe : charakteristische Länge nach der die Wellenfunktion um Faktor 1/e kleiner ist

$\psi_c(x) \sim e^{-\varkappa x}$, $d = 1/\varkappa$, $\psi_c(d) \sim e^{-1}$

$$d = \frac{1}{\varkappa} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}}$$

2.2.2 Streuzustände

$E > 0$



$$A, C: \quad \psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi = -k_0^2 \psi$$

$$k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$B: \quad \psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)\psi = -k^2\psi$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)$$