Je nachdem, welcher Energiebereich vorliegt, haben wir also qualitativ unterschiedliches Verhalten zu erwarten. Die entsprechenden Fälle E_2 und E_3 werden wir daher separat untersuchen. Da das Potential stückweise stetig ist, liegt es nahe, das Problem wieder zunächst in jedem Raumbereich einzeln zu lösen und die Lösungen dann zu verknüpfen. Hierfür benötigen wir aber noch Bedingungen für $x = a$ und $x = -a$. Hierbei hilft uns der folgende Satz.

Satz: Für Potentiale, die stetig sind oder in $\pm a$ maximal einen endlichen Sprung aufweisen, sind die Funktionen $\Psi(x)$ und $\Psi'(x)$ in a und $-a$ stetig.

Beweis: 1) Angenommen, die Wellenfunktion macht an der Stelle a einen Sprung. Dann ist sie proportional zur Theta-Funktion:

$$\psi(x) \propto \Theta(x-a),$$

und es folgt:

$$\psi''(x) \propto \frac{d}{dx}\delta(x-a).$$

2) Analog folgt im Falle eines Sprunges der ersten Ableitung,

$$\psi'(x) \propto \Theta(x-a)\,,$$

auch:

$$\psi''(x) \propto \delta(x-a)$$

Sowohl Fall 1) als auch 2) sind nicht möglich, da sie auf einen Widerspruch zur Schrödinger-Gleichung führen:

$$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar}[E - V(x)]\psi(x)\,.$$

Da $V(x)$ nur einen endlichen Sprung aufweist, darf auch $\psi''(x)$ nur einen endlichen Sprung haben, und damit darf $\psi'(x)$ maximal einen Knick besitzen, muss also stetig sein. Damit ist der Satz bewiesen[19]. Des weiteren erkennt man, dass bei stetigem $V(x)$ zusätzlich auch ψ'' stetig sein muss.

B1) Energie unterhalb des Kastenmaximums. Gebundene Zustände

Wir betrachten nun zunächst den 2. oben aufgelisteten Punkt der Energie E_2:

$$-V_0 \leq E \leq 0$$

Wir berechnen, wie in A), die Lösung der Schrödinger-Gleichung in den Bereichen I-III einzeln und verknüpfen diese dann. Die Verknüpfungsbedingungen sind, nach oben bewiesenem Satz:

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a), \tag{2.44}$$
$$\psi'_I(-a) = \psi'_{II}(-a), \tag{2.45}$$
$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a), \tag{2.46}$$
$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a). \tag{2.47}$$

[19]Im Fall A hatten wir ein Potential mit einem unendlichen Sprung. Daher weist auch die zweite Ableitung einen unendlichen Sprung auf, und die erste Ableitung ist nicht stetig. Dies können wir aber als ein Modellbeispiel betrachten, das physikalisch nicht realisiert wird. Man überzeugt sich aber leicht, dass auch in diesem Fall die Wahrscheinlichkeitsdichte und die -Stromdichte an den Rändern des Kastens stetig sind und damit das physikalisch erwartete Verhalten zeigen.

Außerdem gilt noch die Normierungsbedingung:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \tag{2.48}$$

Damit dieses erfüllt sein kann, fordern wir noch:

$$\lim_{x\to\infty} \psi_{III}(x) = 0, \tag{2.49}$$

$$\lim_{x\to-\infty} \psi_{I}(x) = 0, \tag{2.50}$$

Damit haben wir insgesamt 7 Bedingungen, die unsere Lösung erfüllen muss. Die Schrödinger-Gleichung hat in den Bereichen I und III die Form:

$$\psi''_{I/III}(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi_{I/III}(x) = 0,$$

allerdings ist $E < 0$, und wir können daher auch schreiben:

$$\psi''_{I/III}(x) - \frac{2m}{\hbar^2} |E|\psi_{I/III}(x) = 0.$$

Definiert man nun

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}, \tag{2.51}$$

so ist $\kappa \in \mathbb{R}$, und die Differentialgleichung nimmt die folgende Form an:

$$\psi''_{I/III}(x) - \kappa^2\psi_{I/III}(x) = 0. \tag{2.52}$$

In Bereich II haben wir eine zu A) analoge Differentialgleichung:

$$\psi''_{II}(x) + q^2\psi_{II}(x) = 0, \tag{2.53}$$

mit

$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)}\,, \tag{2.54}$$

mit $q \in \mathbb{R}$. Über den e-Ansatz findet man die Lösung der Differentialgleichungen (2.52) und (2.53). Hierbei müssen die Koeffizienten in den Bereichen I und III nicht gleich sein, da die Randbedingungen für entsprechend verschiedene Lösungen sorgen können. Wir erhalten die Lösungen zu:

$$\psi_I(x) = A_1 e^{\kappa x} + B_1 e^{-\kappa x}, \tag{2.55}$$

$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}, \tag{2.56}$$

$$\psi_{III}(x) = A_3 e^{\kappa x} + B_3 e^{-\kappa x}. \tag{2.57}$$

Wir haben nun die 6 unbekannten Koeffizienten $A_1, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3$ und wissen auch noch nicht, welche Werte die Energie E annehmen darf. Hierfür haben wir 7 Nebenbedingungen. Ziel ist es nun, mit diesen Bedingungen die Lösungen genauer zu bestimmen. Zuerst benutzen wir die Bedingungen (2.49) und (2.50). Offensichtlich müssen dann die Koeffizienten A_3 und B_1

gleich Null sein, damit die Exponentialfunktionen im Unendlichen normierbar bleiben. Unsere Lösungen haben dann die Form:

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= A_1 e^{\kappa x},\\ \psi_{II}(x) &= A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx},\\ \psi_{III}(x) &= B_3 e^{-\kappa x}.\end{aligned}$$

Da wir wieder die Symmetrie $V(x) = V(-x)$ vorliegen haben, gehen wir wieder davon aus, dass die messbaren Größen ebenfalls diese Symmetrie aufweisen, was die folgenden Rechnungen erheblich vereinfacht. Für die Wellenfunktion bedeutet dies:

$$|\psi(x)|^2 = |\psi(-x)|^2, \tag{2.58}$$

womit die zusammengesetzte Lösung aus den drei Teilbereichen gemeint ist. Aus dieser Forderung ergeben sich wieder die gerade Lösung,

$$\psi_+(x) = \psi_+(-x),$$

und die ungerade Lösung,

$$\psi_-(x) = -\psi_-(-x).$$

Gerade Lösung: Wir betrachten also zunächst die Lösung $\psi_+(x)$. Aufgrund der Achsensymmetrie müssen dann bei Vorzeichenwechsel von x die Wellenfunktion des Bereiches III in die Wellenfunktion des Bereiches I übergehen und umgekehrt. Dies ist nur erfüllt für:

$$A_{1_+} = B_{3_+}.$$

Ebenso muss die Wellenfunktion in Bereich II achsensymmetrisch um $x = 0$ sein, woraus folgt:

$$A_{2_+} = B_{2_+}.$$

Für die gerade Lösung nehmen unsere drei Teillösungen also folgende Form an:

$$\begin{aligned}\psi_{I_+}(x) &= A_{1_+} e^{\kappa_+ x},\\ \psi_{II_+}(x) &= 2A_{2_+}\cos(q_+ x),\\ \psi_{III_+}(x) &= A_{1_+} e^{-\kappa_+ x}.\end{aligned}$$

Setzen wir nun unsere Randbedingungen (Stetigkeit der Funktion und der Ableitung) für $-a$ ein, so erhalten wir folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned}A_{1_+} e^{-\kappa_+ a} - 2A_{2_+}\cos(q_+ a) &= 0\\ A_{1_+}\cdot\kappa_+ e^{-\kappa_+ a} - 2q_+ A_{2_+}\sin(q_+ a) &= 0\end{aligned}$$

Also haben wir wieder ein homogenes lineares Gleichungssystem für A_{1_+} und A_{2_+}, dessen Lösbarkeitsbedingung über die Determinante gegeben ist:

$$\begin{aligned}0 &= \det\begin{pmatrix} e^{-\kappa_+ a} & -2\cos(q_+ a)\\ \kappa_+ e^{-\kappa_+ a} & -2q_+\sin(q_+ a)\end{pmatrix}\\ &= -q_+\sin(q_+ a)e^{-\kappa_+ a} + \kappa_+\cos(q_+ a)e^{-\kappa_+ a}\\ \text{also folgt}\qquad \tan(q_+ a) &= \frac{\kappa_+}{q_+}.\end{aligned}$$

Die Lösbarkeitsbedingung der geraden Lösungen, und damit die Einschränkungen der möglichen Energie-Eigenwerte E_+, ist gegeben durch:

$$\tan(q_+ a) = \frac{\kappa_+}{q_+} \tag{2.59}$$

Aus dem obigen Gleichungssystem kann man jetzt noch A_{2_+} mit A_{1_+} in Beziehung setzen. Es ergibt sich:

$$A_{2_+} = \frac{A_{1_+}}{2} \frac{e^{-\kappa_+ a}}{\cos(q_+ a)}\,.$$

Der letzte unbekannt Koeffizient A_{1_+} ergibt sich dann aus der Normierung, welche wir hier kurz vorführen:

$$1 = 2\int_0^\infty |\psi_+(x)|^2 dx = 2\int_0^a |\psi_{II_+}(x)|^2 dx + 2\int_a^\infty |\psi_{III_+}(x)|^2 =$$

$$= 8\left(\frac{A_{1_+}}{2}\right)^2 \left(\frac{e^{-\kappa_+ a}}{\cos(q_+ a)}\right)^2 \int_0^a \cos^2(q_+ x) dx = 2A_{1_+}^2 \int_a^{infty} e^{-2\kappa_+ x} dx.$$

$$\frac{1}{2A_{1_+}^2} = \frac{e^{-2\kappa_+ a}}{\cos^2(q_+ a)} \left(\frac{a}{2} + \frac{1}{4q_+}\sin(2q_+ a)\right) + \frac{1}{2\kappa_+} e^{-2\kappa_+ a}$$

Hieraus ergibt sich dann die Lösung für $A_{1_+}(E)$.

Ungerade Lösung: Aufgrund der Punktsymmetrie von $\psi_-(x)$ folgt analog zu obigen Überlegungen $A_{2_-} = -B_{2_-}$ und $A_{1_-} = -B_{3_-}$. Unsere Teillösungen sehen dann wie folgt aus:

$$\psi_{I_-}(x) = A_{1_-} e^{\kappa_- x},$$
$$\psi_{II_-}(x) = 2iA_{2_-} \sin(q_- x),$$
$$\psi_{III_-}(x) = -A_{1_-} e^{-\kappa_- x}.$$

Nutzen wir nun die Randbedingungen bei a, so erhalten wir das folgende lineare homogene Gleichungssystem für A_{1_-} und A_{2_-}:

$$-A_{1_-} e^{-\kappa_- a} - 2iA_{2_-} \sin(q_- x) = 0,$$
$$A_{1_-} \kappa_- e^{-\kappa_- a} - 2iq_- A_{2_-} \cos(q_- a) = 0.$$

Analog zu den vorherigen Überlegungen erhält man durch Bilden der Determinante die Lösbarkeitsbedingung.

Die Lösbarkeitsbedingung der ungeraden Lösungen, und damit die Einschränkungen der möglichen Energie-Eigenwerte E_+, ist gegeben durch:

$$\cot(q_- a) = -\frac{\kappa_-}{q_-} \tag{2.60}$$

Auch kann man wieder

$$A_{2_-} = i\frac{A_{1_-}}{2} \frac{e^{-\kappa_- a}}{\sin(q_- a)}$$

schreiben, und der Koeffizient A_{1_-} folgt dann wieder analog zu oben aus der Normierung.

Bestimmung der Energie-Eigenwerte und ihrer Abhängigkeit vom Potential: Wie schon erwähnt, erwarten wir für den Fall $-V_0 \leq E \leq 0$ wieder ein diskretes Energie-Spektrum E_n mit

$$-V_0 \leq E_n \leq 0,$$

das sich aus den Lösbarkeitsbedingungen für die gerade bzw. ungerade Lösung ergeben muss [Gleichung (2.59) und Gleichung (2.60)]. Es ist hierzu zweckmäßig, sich die Definitionen von κ und q in Erinnerung zu rufen:

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}\,,$$

$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)}\,.$$

Wie leicht zu sehen ist, haben beide Größen die gleiche Einheit – die einer Wellenzahl:

$$[\kappa] = \sqrt{\frac{kg}{J^2 \cdot s^2}J} = \sqrt{\frac{kg}{J \cdot s^2}} = \sqrt{\frac{kg}{s^2}\frac{s^2}{kg \cdot m^2}} = \frac{1}{m}.$$

Wir können also die dimensionslosen Größen u und v definieren:

$$u_{n_\pm} = \kappa_{n_\pm} a,$$
$$v_{n_\pm} = q_{n_\pm} a,$$

was wir gleichzeitig für den geraden und den ungeraden Fall aufgeschrieben haben. Außerdem versehen wir die Größen, gemäß unserer Erwartung, nach diskreten Energien mit dem Index n. Beachte, dass $u_{n_\pm}, v_{n_\pm} \geq 0$ gilt. Die Lösbarkeitsbedingung wird dann für die geraden Funktionen:

$$v_{n_+} \tan(v_{n_+}) = u_{n_+}, \tag{2.61}$$

und für die ungeraden Funktionen:

$$v_{n_-} \cot(v_{n_-}) = -u_{n_-}. \tag{2.62}$$

Definiert man weiter die zur minimalen kinetischen Energie aus A) proportionale Größe, T_0 durch

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} > 0,$$

so gilt

$$u_n^2 = -\frac{1}{T_0}E_n,$$

und

$$v_n^2 = \frac{1}{T_0}(E_n + V_0).$$

Es muss also auch mit $w^2 := \frac{V_0}{T_0} > 0$ für alle n gelten:

$$u_n^2 + v_n^2 = w^2. \tag{2.63}$$

Dies ist eine Kreisgleichung für die v_n und u_n. Diese muss gleichzeitig mit Glg. (2.61) und (2.62) erfüllt sein. Hieraus ergeben sich dann die möglichen diskreten Energien:

$$E_n = T_0 \cdot v_n^2 - V_0.$$

Dies macht man sich am besten graphisch klar, vgl. Abbildung 2.24.

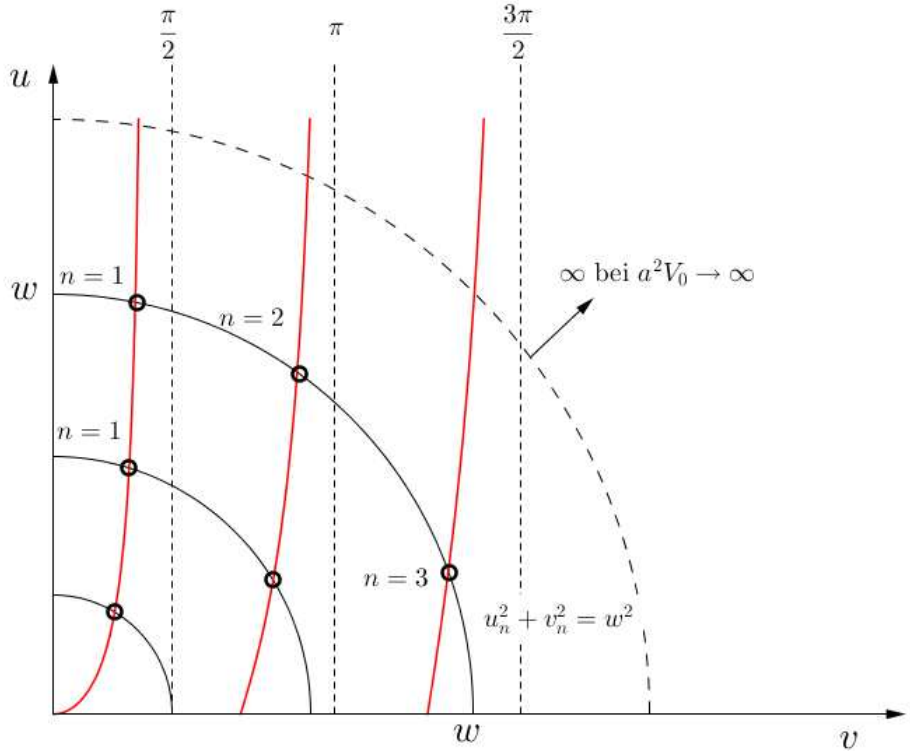


Abbildung 2.24: Graphisches Ermitteln der diskreten Energie-Eigenwerte für einen Potentialkasten endlicher Tiefe (Fall B1).

Die rot gefärbte Funktion stellt $v_n \tan v_n$ dar, und die eingezeichneten Kreise sind die Kreisgleichungen. Schnittpunkte der Kreise mit der Funktion ergeben die diskreten Lösungen. Diese erfüllen beide Gleichungen und sind damit zulässig. Da w proportional zu $V_0 a^2$ ist, wächst mit größerem V_0 die Anzahl der Schnittpunkte. Je tiefer das Potential also ist, desto mehr diskrete Energien findet man. Man beachte, dass der Grundzustand E_1 immer existiert (wenn $V_0 > 0$). Im Grenzfall sehr starker Bindungen ($V_0 \to \infty$) erhalten wir das aus A) bekannte Resultat des Kastens mit unendlich hohen Wänden:

$$E_n \to T_0 \left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 - V_0$$

Wir schauen uns nun das Energie-Spektrum in Abhängigkeit der zur Potentialstärke proportionalen Größe w etwas genauer an. Nehmen wir zunächst an, dass w gegen v_n geht, also klein ist. Dann gilt auch $\tan v_n \approx v_n$ und $u_n \approx v_n^2$. Also folgt aus $u_n^2 + v_n^2 = w^2$:

$$v_n^2 = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + 4w^2} \approx w^2 - w^4 + ...$$

Allgemein gilt dann:

$$\lim_{w\to 0} \frac{E_n}{V_0} = \lim_{w\to 0} \frac{v_n^2}{w^2} - 1 = -w^2 + O(w^4)$$

Betrachten wir nun große w. Dann gilt wie bereits gesagt:

$$\lim_{w\to\infty} \frac{E_n}{V_0} = \left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 \frac{1}{w} - 1$$

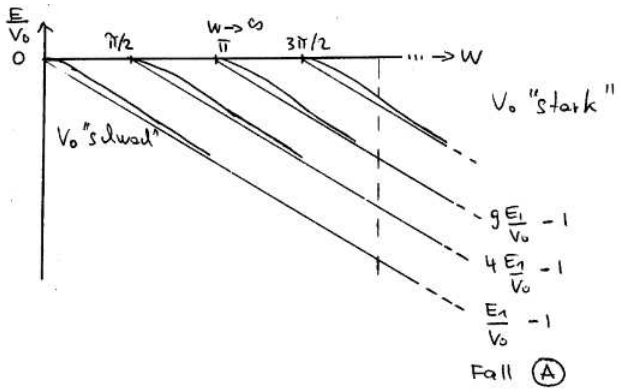


Abbildung 2.25: Darstellung des Energie-Spektrums in Abhängigkeit von w

Fazit: Für Energien E mit $-V_0 \leq E \leq 0$ erhalten wir ein diskretes Energie-Spektrum, und die Anzahl der Eigenwerte (Bindungszustände) ist abhängig von der Stärke des Potentials. Für ein gegen Null gehendes Potential verschwinden die Bindungszustände nacheinander, und das Energie-Spektrum geht in ein kontinuierliches Spektrum über. Der Grundzustand E_1 verschwindet jedoch nie. Experimentell messbar wäre z.B. das Verschwinden von Strahlungslinien mit Frequenzen proportional zu:

$$E_{mn} = E_m - E_n$$

mit $m > n$.

B2) Energie über dem Maximum des Potentials

Wir betrachten nun den Fall der Energie E_3, also:

$$E > 0\,.$$

Wir erwarten ein sogenanntes Streuspektrum (kontinuierlich). Wir haben wieder unsere beiden reellen Parameter

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

und

$$q = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}\,,$$

mit denen wir die Lösungen beschreiben können. Wir erhalten:

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & ,\ x < -a \\ \psi_{II}(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx} & ,\ x \in [-a, a] \\ \psi_{III}(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} & ,\ x > a. \end{cases}$$

Es gibt nun zwei Fälle: damit ein stationärer Zustand vorliegt, benötigen wir eine stationäre Teilchenquelle in großem Abstand von unserem System, also entweder links oder rechts vom Potentialkasten. Die Welle (allgemeiner: das Wellenpaket) kann also entweder von links oder von rechts einlaufen. Wir wählen im Folgenden links als die Einfallsrichtung. Alle Überlegungen ergeben sich analog auch für die andere Richtung.[20]

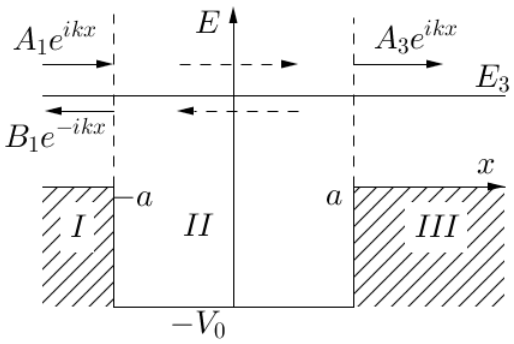


Abbildung 2.26: Fall B2: $E > 0$. Von links in den Kasten einlaufende Wellenfunktion mit Amplitude A_1. Den Kasten verlassen nach rechts die transmittierte Welle (Amplitude A_3) und nach links die reflektierte Welle (Amplitude B_1).

Es ist klar, dass in diesem Fall $B_3 = 0$ gelten muss, da wegen der unendlichen Ausdehnung des Systems kein reflektierter Beitrag von rechts kommen kann. Hierdurch haben wir einen Bruch der Spiegelsymmetrie und können deren Eigenschaften nicht mehr so einfach ausnutzen. Die Struktur der Lösung der Schrödinger-Gleichung in den Bereichen I, II und III legt nahe, dass bei $x = -a$ und $x = a$ (partielle) Reflexion auftritt. Die ist ein rein quantenmechanischer Effekt, und die Rechnung muss erst zeigen, ob, wann und wie stark der Effekt auftritt.

Sei j_T die bei a durchgehende (transmittierte) Wahrscheinlichkeits-Stromdichte, j_R die bei $-a$ zurücklaufende Wahrscheinlichkeits-Stromdichte und j_{ein} die bei $-a$ einfallende Wahrscheinlichkeitsstromdichte. Seien alle Wahrscheinlichkeitsstromdichten parallel zur x-Achse orientiert. Dann nennen wir

$$T = \frac{j_T}{j_{ein}} \tag{2.64}$$

den **Transmissionskoeffizienten**. Außerdem nennen wir

$$R = \frac{|j_R|}{j_{ein}} \tag{2.65}$$

den **Reflexionskoeffizienten**.

Bemerkung: Die Situation ist ähnlich zu der stationärer Ströme in der Elektrizitätslehre (Kirchhoffsche Knotenregel). Die Wahrscheinlichkeits-Stromdichten ergeben - mit der Ladung multipliziert - die elektrischen Stromdichten. Unsere gesamter Kasten kann hier als "Verzweigungsknoten" angesehen werden.

Berechnung der Koeffizienten. Schauen wir uns nun die entsprechenden Wellenfunktionen an. Der in I rückläufige Anteil wird beschrieben durch:

$$\psi_R = B_1 e^{-ikx}$$

[20] Wir könnten auch den symmetrischen Fall betrachten, dass wir links und rechts identische Quellen vorliegen haben. Aber dieser Fall folgt aus der Überlagerung der beiden anderen.

Der transmittierte Anteil ist gegeben durch:

$$\psi_T = A_3 e^{ikx},$$

und die bei a einfallende Wellenfunktion ist:

$$\psi_{ein} = A_1 e^{ikx}.$$

Erinnern wir uns nun an die Definition der Wahrscheinlichkeits-Stromdichte

$$j = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \psi' - \psi^{*'} \psi),$$

so lassen sich die gesuchten Größen leicht zu

$$j_{ein} = \frac{\hbar k}{m}|A_1|^2,$$

$$j_T = \frac{\hbar k}{m}|A_3|^2,$$

$$j_R = -\frac{\hbar k}{m}|B_1|^2,$$

berechnen. Hieraus bilden wir dann den Reflexions- und Transmissionskoeffizienten:

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}, \tag{2.66}$$

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}. \tag{2.67}$$

Man beachte, dass hierbei immer–aufgrund der Teilchenzahlerhaltung–

$$R + T = 1, \tag{2.68}$$

gelten muss. Die Koeffizienten folgen nun aus den gewohnten Randbedingungen der Stetigkeit von ψ und ψ' bei a und $-a$. Es ergibt sich folgendes inhomogenes Gleichungssystem für die Koeffizienten:

$$\begin{aligned}
-B_1 e^{ika} + A_2 e^{-iqa} + B_2 e^{iqa} + 0 &= A_1 e^{-ika}, \\
kB_1 e^{ika} + qA_2 e^{-iqa} - qB_2 e^{iqa} + 0 &= kA_1 e^{-ika}, \\
0 - A_2 e^{iqa} - B_2 e^{-iqa} + A_3 e^{ika} &= 0, \\
0 - A_2 q e^{iqa} + B_2 q e^{-iqa} + kA_3 e^{ika} &= 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{array}{cccccc}
B_1 & A_2 & B_2 & A_3 & \text{Inhomogenität} \\
\end{array}$$

Wir haben also 4 gesuchte Koeffizienten B_1, A_2, B_2, A_3, die wir in Abhängigkeit von A_1 ausdrücken können. Für diese Größen haben wir vier Gleichungen zur Verfügung, die ein lineares aber *inhomogenes* Gleichungssystem für die Koeffizienten bilden. Entsprechend unterscheidet sich die Lösung von den bisherigen Fällen.
Wir definieren folgende dimensionslose Größen, um die Rechnung übersichtlicher zu machen:

$$\begin{aligned}
u &= ka, \\
v &= qa, \\
w &= \frac{v}{u} = \frac{q}{k}, \\
s &= w + 1, \\
t &= 1 - w.
\end{aligned}$$

Wir berechnen nun zuerst die Determinante der Koeffizientenmatrix:

$$\begin{aligned}
D &= \begin{vmatrix} -e^{iu} & e^{-iv} & e^{iv} & 0 \\ ue^{iu} & ve^{-iv} & -ve^{iv} & 0 \\ 0 & -e^{iv} & -e^{-iv} & e^{iu} \\ 0 & -ve^{iv} & ve^{-iv} & ue^{iu} \end{vmatrix} \cdot \frac{1}{a^2} \\
&= e^{iv}e^{-iv}\frac{e^{2iu}}{a^2} \begin{vmatrix} -1 & e^{-2iv} & e^{2iv} & 0 \\ u & ve^{-2iv} & -ve^{2iv} & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -v & v & u \end{vmatrix} \\
&= \frac{u^2}{a^2}e^{2iu} \begin{vmatrix} -1 & e^{-2iv} & e^{2iv} & 0 \\ 1 & we^{-2iv} & -we^{2iv} & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -w & w & 1 \end{vmatrix}
\end{aligned}$$

Die jeweils ausgeklammerten Faktoren sind hier rot markiert. Weiter folgt, nach Addieren der vierten Spalte zur Dritten und Zweiten, sowie Addition der ersten Zeile zur zweiten Zeile:

$$\begin{aligned}
D &= \frac{u^2}{a^2}e^{2iu} \begin{vmatrix} -1 & e^{-2iv} & e^{2iv} & 0 \\ 0 & se^{-2iv} & te^{2iv} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & t & s & 1 \end{vmatrix} \\
&= -\frac{u^2}{a^2}e^{2iu}(-1) \begin{vmatrix} se^{-2iv} & te^{2iv} \\ t & s \end{vmatrix} \\
&= -k^2e^{2ika} \cdot C
\end{aligned}$$

Hierbei ist C gegeben durch:

$$\begin{aligned}
C :&= \left(1-\frac{q}{k}\right)^2 e^{2iqa} - \left(1+\frac{q}{k}\right)^2 e^{-2iqa} \\
&= -4\frac{q}{k}\cos 2qa + 2i\left(1+\frac{q^2}{k^2}\right)\sin 2qa
\end{aligned}$$

Nach der Cramerschen Regel erhält man nun den i-ten Koeffizienten durch:

$$A_i = \frac{\tilde{D}}{D}$$

Hierbei ist $\tilde{D}$ die Determinante derjenigen Matrix in der man in der Koeffizientenmatrix die i-te Spalte durch die Lösungspalte ersetzt hat. Für A_2 ist dies zum Beispiel:

$$\begin{aligned}
A_2 &= \frac{1}{D} \begin{vmatrix} -e^{ika} & A_1e^{-ika} & e^{iqa} & 0 \\ ke^{ika} & A_1ke^{-ika} & -qe^{iqa} & 0 \\ 0 & 0 & -e^{-iqa} & e^{ika} \\ 0 & 0 & qe^{-iqa} & ke^{ika} \end{vmatrix} \\
&= \frac{k^2}{D}e^{i(k-q)a} \begin{vmatrix} 2A_1 & te^{2iaq} & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & w & 1 \end{vmatrix} \\
&= \frac{2A_1}{D}k^2e^{i(k-q)a}\left(1+\frac{q}{k}\right)
\end{aligned}$$

Also gilt:

$$A_2 = -2\frac{A_1}{C}\left(1+\frac{q}{k}\right)e^{-i(k+q)a} \tag{2.69}$$

Berechnen wir nun B_1:

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{1}{D}\begin{vmatrix} A_1e^{-iu} & e^{-iv} & e^{iv} & 0 \\ kA_1e^{-iu} & qe^{-iv} & -qe^{iv} & 0 \\ 0 & -e^{iv} & -e^{-iv} & e^{iu} \\ 0 & -qe^{iv} & qe^{-iv} & ke^{iu} \end{vmatrix} \\ &= \frac{k^2}{D}e^{iu}\begin{vmatrix} A_1 & e^{-2iv} & e^{2iv} \\ A_1 & we^{-2iv} & -we^{2iv} \\ 0 & -t & -s \end{vmatrix} \\ &= -\frac{2iA_1k^2}{D}\left(1-\frac{q^2}{k^2}\right)\sin 2qa \end{aligned}$$

Der Koeffizient B_1 ist also:

$$B_1 = \frac{2iA_1}{C}\left(1-\frac{q^2}{k^2}\right)e^{-2ika}\cdot\sin 2qa \tag{2.70}$$

Kommen wir zu B_2:

$$\begin{aligned} B_2 &= \frac{k^2}{D}\begin{vmatrix} -e^{iu} & e^{-iv} & A_1e^{-iu} & 0 \\ e^{iu} & we^{-iv} & A_1e^{-iu} & 0 \\ 0 & -e^{iv} & 0 & e^{iu} \\ 0 & -we^{iv} & 0 & e^{iu} \end{vmatrix} \\ &= -\frac{2A_1k^2}{D}e^{i(u+v)}(1-w) \end{aligned}$$

Der Koeffizient B_2 ist also:

$$B_2 = \frac{2A_1}{C}e^{i(q-k)a}\left(1-\frac{q}{k}\right) \tag{2.71}$$

Berechnen wir nun noch A_3:

$$\begin{aligned} A_3 &= \frac{k^2}{D}\begin{vmatrix} -e^{iu} & e^{-iv} & e^{iv} & A_1e^{-iu} \\ e^{iu} & we^{-iv} & -we^{iv} & A_1e^{-iu} \\ 0 & -e^{iv} & -e^{-iv} & 0 \\ 0 & -we^{iv} & we^{-iv} & 0 \end{vmatrix} \\ &= \frac{k^2}{D}2A_1\cdot 2w \end{aligned}$$

Der letzte Koeffizient A_3 ergibt sich dann zu:

$$A_3 = -\frac{4A_1}{C}\frac{q}{k}e^{-2ika} \tag{2.72}$$

Mit diesen Koeffizienten können wir nun das Resultat für den Transmissions- und den Reflexionskoeffizienten berechnen. Nun wird auch klar, warum wir die Koeffizienten in Abhängigkeit von A_1 berechnet haben, da dieser nun überall heraus fällt. Es folgt:

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{16}{|C|^2}\left(\frac{q}{k}\right)^2,$$

und

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{4}{|C|^2}\left(1 - \frac{q^2}{k^2}\right)^2 \sin^2 2qa.$$

Hierbei ist $|C|^2$:

$$|C|^2 = 16\frac{q^2}{k^2} + 4\left(1 - \frac{q^2}{k^2}\right)^2 \sin^2 2qa$$

Reflexionskoeffizient R und Transmissionskoeffizient T im Fall des Potentialtopfes endlicher Tiefe, bei einer Energie oberhalb des Potentialmaximums, $E > V_{max} = 0$:

$$R = \frac{\frac{1}{4}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)^2 \sin^2 2qa}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)^2 \sin^2 2qa} \tag{2.73}$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)^2 \sin^2 2qa} \tag{2.74}$$

Um uns die genaue Energieabhängigkeit klar zu machen, setzen wir die Größen k und q wieder ein. Besprechen wir zunächst, in welchen Fällen die Transmission gleich 1 wird:

- Gilt $q = k$, so ist $V_0 = 0$ und $T = 1$. Es gibt kein Potential. Diese Lösung ist trivial.

- Sei nun also $q \neq k$. Nun gibt es noch die Möglichkeit, dass der Sinusterm Null wird. Dementsprechend gilt:

  $$T = 1 \Leftrightarrow 2qa = n\pi\,,$$

  mit $n \in \mathbb{N}$. Was bedeutet nun $qa = \frac{n\pi}{2}$? Es ist $qa = v$ genau die in A) eingeführte Größe, mit der galt:

  $$E_n = \left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 T_0 - V_0 > 0$$

  für den Fall, dass $-V_0 = -\infty$ gilt. Hierbei war $T_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$.

In diesen Fällen tritt also vollständige Transmission–wie in klassischen Systemen–auf. Diese charakteristischen Werte der Energie nennt man auch *Resonanzen*.
Beschäftigen wir uns nun mit den Minima der Transmission. Trägt man den Transmissionkoeffizienten über $\frac{E}{V_0}$ auf, so erhält man die Kurve, die in Abb. 2.27 gezeigt ist:

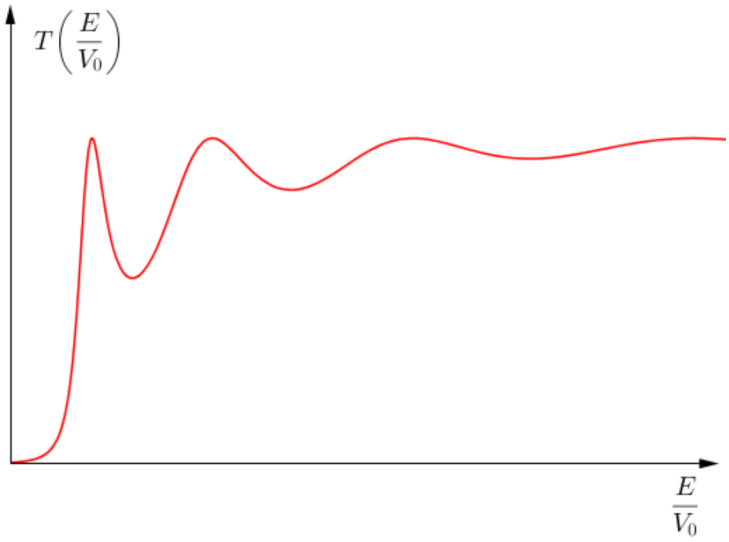


Abbildung 2.27: Abhängigkeit des Transmissionskoeffizienten von E/V_0. An den Maxima ist $T = 1$ (Resonanzen).

Die Minima stellen sich ein, wenn der Nenner des Transmissionkoeffizienten maximal wird, also genau dann, wenn

$$\sin^2 2qa = 1$$

gilt. Also haben wir die Bedingung für ein Minimum:

$$2q_n a = (2n+1)\frac{\pi}{2}$$

Hieraus folgt für die Energie dieses Minimums:

$$E_{min_n} = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \frac{\pi^2}{4} T_0 - V_0$$

Wir können dann die Minima des Transmissionskoeffizienten bestimmen, indem wir

$$\left(\frac{q_n}{k_n}\right)^2 = 1 + \frac{V_0}{E_n}$$

benutzen.

$$\begin{aligned} T_{min_n} &= \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{q_n}{k_n} - \frac{k_n}{q_n}\right)^2} \\ &= \left[1 + \frac{V_0^2}{4E_n(E_n + V_0)}\right]^{-1} \\ &= \left[1 + \frac{\frac{V_0^2}{4}}{\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 \frac{\pi^2}{4} T_0 \left[\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi^2}{4}T_0 - V_0\right]}\right]^{-1} \end{aligned}$$

Man kann sich die Entstehung der Transmissionsmaxima durch Resonanzen erklären. Es sind die Punkte, in denen die Frequenz der Wellenfunktion für eine stehende Welle mit Bereich über dem Potential sorgt. Es gibt also keine Interferenzen mit Wellen, welche an der (bei einer von links einlaufenden Welle) Stelle a reflektiert werden. Die Transmissionswahrscheinlichkeit ist hier dann aufgrund der fehlenden Auslöschung höher.