P 7)

$|x| < b$: $\psi'' = -(u_0 + \varepsilon)\psi$; $u_0 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0$

$|x| > b$: $\psi'' = -\varepsilon\psi$

Gebundene Zustände gibt es für

$$-u_0 < \varepsilon < 0$$

Dann ist $u_0 + \varepsilon > 0$, und für $|x| < b$ ist

$$\psi(x) = A \exp(ik'x) + B \exp(-ik'x)$$

mit $k' = \sqrt{u_0 + \varepsilon} > 0$.

Für $|x| > b$ sind die Lösungen

$$\psi(x) = A' \exp(\varkappa x) + B' \exp(-\varkappa x)$$

mit $\varkappa = \sqrt{-\varepsilon} > 0$.

Wegen der Symmetrie unter Raumspiegelungen, können wir die Energieeigenfunktionen als gerade und ungerade Funktionen (Parität ± 1) wählen, und uns damit die Arbeit erleichtern.

Wellenfunktionen mit $P = +1$ $[\psi(x) = +\psi(-x)]$

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos(k'x) & \text{für } |x| < b \\ A' \exp(-\varkappa|x|) & \text{für } x > b, \end{cases} \qquad (L1)$$

wobei wir berücksichtigt haben, daß die Lsgn. für $x \to \pm\infty$ exp. fallen müssen, damit

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

erfüllbar ist. Wir brauchen nun die Stetigkeitsbed. nur bei $x = b$ beachten, weil sie dann auch bei $x = -b$ erfüllt ist (wegen $\psi(x) = \psi(-x)$):

$$\psi:\ A\cos(k'b) - A'\exp(-\varkappa b) = 0 \qquad (L2)$$

$$\psi':\ -Ak'\sin(k'b) + A'\varkappa\exp(-\varkappa b) = 0$$

Damit (L2) von 0 verschiedene Lsgn. besitzt, muß

$$\det \begin{pmatrix} \cos(k' b) & -\exp(-\varkappa b) \\ -k' \sin(k' b) & \varkappa \exp(-\varkappa b) \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0$$

sein, also

$$\exp(-\varkappa b) \left[\varkappa \cos(k' b) - k' \sin(k' b)\right] = 0$$

$$\Rightarrow \quad \tan(k' b) = \frac{\varkappa}{k'}$$

oder mit $y = k' b$.

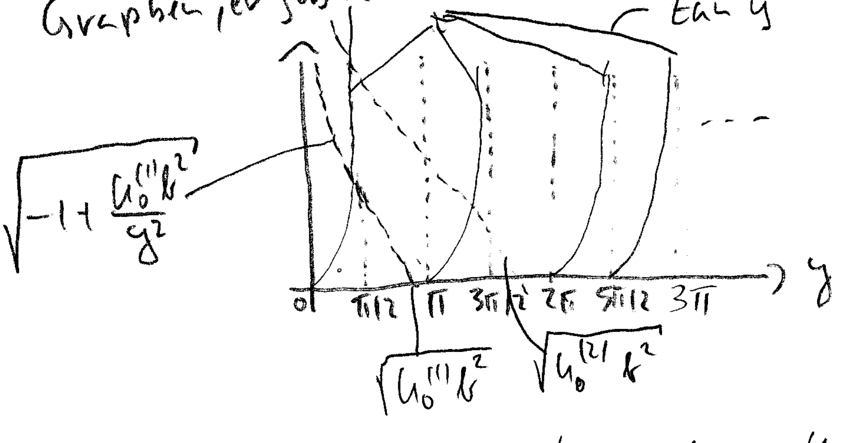
$$\varkappa = \sqrt{-\varepsilon} = \sqrt{U_0 - k'^2} = \frac{1}{b}\sqrt{U_0 b^2 - y^2}$$

$$\tan y = \frac{b\varkappa}{b k'} = \frac{\sqrt{U_0 b^2 - y^2}}{y} = \sqrt{\frac{U_0 b^2}{y^2} - 1} \qquad (L3)$$

Diese Gleichung müssen wir nach y auflösen, um die gebundenen Energieeigenwerte zu finden:

$$\varepsilon = -\varkappa^2 = -U_0 + \frac{y^2}{b^2}$$

Wir suchen Lösungen $y > 0$, und es muß freilich $y^2 < U_0 b^2$ sein. Zeichnen wir nun $\tan y$ und $\sqrt{\frac{U_0 b^2}{y^2} - 1}$ in einen Graphen, ergeben die Schnittpunkte der Kurven die Lösungen:



Wir sehen, daß es je nach Wert von U_0 stets 1 Lösung gibt. Je tiefer der Topf, desto mehr geb. Zustände existieren also.

Da jeder Zweig des $\tan y$ monoton wächst, $\sqrt{\frac{u_0 b^2}{y^2}-1}$

aber monoton fällt besitzen die Kurven jeweils höchstens einen Schnittpunkt pro Zweig des tan.

Zu geraden Eigenzuständen gibt es stets eine endliche Anzahl n_g Lösungen, und zwar

$$n_g = 1 \text{ falls } \sqrt{u_0 b^2} < \pi$$

$$n_g = 2 \text{ falls } \pi \leq \sqrt{u_0 b^2} < 2\pi$$

$$\vdots$$

$$n_g : \text{ falls } (n_g - 1) \leq \sqrt{u_0 b^2} < n_g \pi$$

Es ist also

$$n_g = \operatorname{int}\left(\sqrt{u_0 b^2}\right),$$

wo $\operatorname{int}(z)$ die größte nat. Zahl $n \leq z$ ist.

Die Lösungen liegen stets in den Intervallen

$$y_1 \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right) ; \; y_2 \in \left[\pi, \frac{3\pi}{2}\right) ; \cdots ; \; y_{n_g} = \left[(n_g - 1)\pi, \frac{2n_g - 1}{2}\pi\right)$$

Man kann all diese Lsgn. sehr effizient numerisch mit der Bisektionsmethode bestimmen!

Für jede Lösung $y_j^{(g)}$ $(j \in \{1, 2, \cdots, n_g\})$ ist dann wegen (L2)

$$A' = A \frac{\cos(y_j^{(g)})}{\exp(-\varkappa_j^{(g)} b)} = A \cos(y_j^{(g)}) \exp(\varkappa_j^{(g)} b)$$

$$\text{mit } \varkappa_j^{(g)} = \frac{1}{b}\sqrt{u_0 b^2 - y_j^{(g)2}}$$

Wellenfunktionen mit $P = -1$ $[\psi(x) = -\psi(-x)]$

$$\psi(x) = \begin{cases} B \sin(k' x) & \text{für } |x| < b \\ B' \operatorname{sign} x \cdot \exp(-\varkappa |x|) \end{cases}$$

Stetigkeitsbed. bei $x=b$

$$\psi: \quad B\sin(k'b) - B'\exp(-\varkappa b) = 0$$

$$\psi': \quad B\,k'\cos(k'b) - B'\varkappa\exp(-\varkappa b) = 0$$

von 0 verschiedene Lsgn $\Rightarrow$

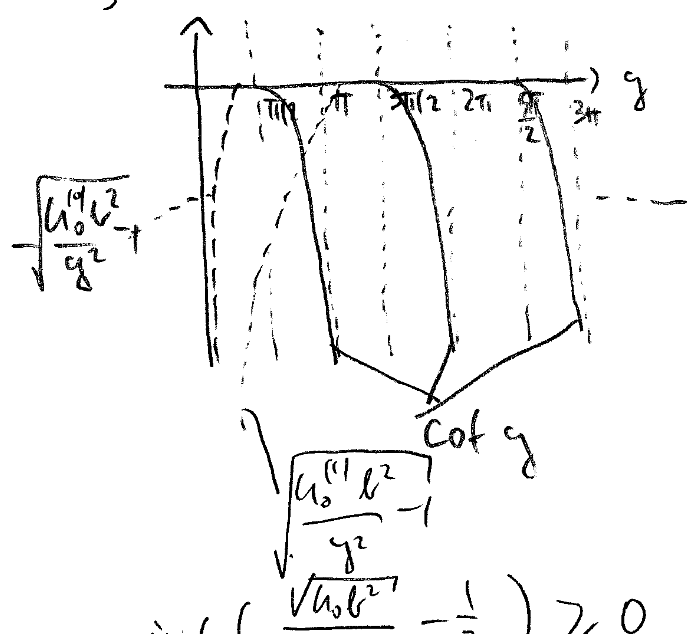
$$\det\begin{pmatrix} \sin(k'b) & -\exp(-\varkappa b) \\ k'\cos(k'b) & -\varkappa\exp(-\varkappa b)\end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow -\exp(-\varkappa b)\left[\varkappa\sin(k'b) - k'\cos(k'b)\right] = 0$$

$$\Rightarrow \cot(k'b) = -\frac{\varkappa}{k'}$$

$$\Rightarrow \cot y = -\sqrt{\frac{u_0 b^2}{y^2} - 1}$$

Analog wie oben graphisch:



$$n_u = \operatorname{int}\left(\frac{\sqrt{u_0 b^2}}{\pi} - \frac{1}{2}\right) \geq 0$$

$$y_1^{(u)} \in \left[\frac{\pi}{2}, \pi\right) ;\ y_2^{(u)} \in \left[\frac{3}{2}\pi, 2\pi\right) \cdots y_{n_u}^{(u)} \in \left[\frac{2n_u - 1}{2}\pi, n_u\pi\right)$$

$$B' = B\sin(k'b)\exp(\varkappa b)$$

Zu jedem diskreten Energieeigenwert gibt es genau einen geb. Zustand! ⇒ Geb. Zustände nicht entartet. (5)

(b) Ungebundene Zustände (Streuzustände)

Jedes $E > 0$ ist erlaubt, und es gibt jeweils eine mit Parität ±1 Eigenfunktionen ⇒ $E > 0$-Eigenzustände doppelt entartet.

Wellenfunktionen mit $P = 1$

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A \cos(k'x) & \text{für } |x| < b \; ; \; k' = \sqrt{V_0 + E} \\ A' \cos(kx) + B' \sin(|kx|) & \text{für } |x| > b \; ; \; k = \sqrt{E} \end{cases}$$

Stetigkeitsbed. bei b:

ψ: $A \cos(k'b) - A' \cos(kb) - B' \sin(kb) = 0$

ψ': $-Ak' \sin(k'b) + A' k \sin(kb) - B' \cos(kb) = 0$

⇒ Finde stets zwei der 2 Koeffizienten A', B' als Funktion von A. Die verbleibende Konstante A kann benutzt werden, um die Normierung gem. Gl. (4) festzulegen.

Wellenfktn. mit $P = -1$

$$\psi_E(x) = \begin{matrix} A \sin(k'x) & \text{für } |x| < b \\ A' \operatorname{sign} x \cos(kx) + B' \sin(kx) & \text{für } |x| > b \end{matrix}$$

ψ: $A \sin(k'b) - A' \cos(kb) - B' \sin(kb) = 0$

$A k' \cos(k'b) + A' k \sin(kb) - B' k \cos(kb) = 0$

⇒ Genau analoger Schluß wie bei $P = -1$

⇒ Es gibt zwei linear unabh. Eigenfunktionen zu jedem Energieeigenwert > 0.