Doppelmuldenpotential

Allgemeiner Ansatz:

$$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad \text{mit } k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}E} \tag{1}$$

$$\psi_{II} = Ce^{qx} + De^{-qx} \qquad \text{mit } q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(V-E)} \tag{2}$$

$$\psi_{III} = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \qquad \text{mit (siehe } \psi_I)k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}E} \tag{3}$$

Die Randbedingung besagt, dass die Wellenfuktion am Rand des unendlichen Potentials verschwindet. Das kann man für eine Konkretisierung von Teilbereich I und III ausnutzen:

$$\begin{aligned}
\psi_I(-b) &= 0 = Ae^{-ikb} + Be^{ikb} &(4)\\
\Leftrightarrow A &= -Be^{2ikb} \qquad \text{A in 1 einsetzen} &(5)\\
\psi_I(x) &= -Be^{2ikb}e^{ikx} + Be^{-ikx} &(6)\\
&= -B(e^{2ikb}e^{ikx} - e^{-ikx}) &(7)\\
&= -Be^{ikb}(e^{ikb}e^{ikx} - e^{-ikb}e^{-ikx}) &(8)\\
&= \underbrace{-Be^{ikb}2i}_{\alpha}\sin(k(x+b)) &(9)
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \psi_I(x) = \alpha\sin(k(x+b)) \tag{10}$$

$$\begin{aligned}
\psi_{III}(b) &= 0 = Fe^{ikb} + Ge^{-ikb} &(11)\\
\Leftrightarrow G &= -Fe^{2ikb} \qquad \text{G in 3 einsetzen} &(12)\\
\psi_{III}(x) &= Fe^{ikx} - Fe^{2ikb}e^{-ikx} &(13)\\
&= -F(e^{2ikb}e^{-ikx} - e^{ikx}) &(14)\\
&= -Fe^{ikb}(e^{ikb}e^{-ikx} - e^{-ikb}e^{ikx}) &(15)\\
&= \underbrace{-Fe^{ikb}}_{\beta}\sin(k(-x+b)) &(16)\\
&= \beta\sin(k(-x+b)) &(17)
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \psi_{III}(x) = \beta\sin(k(b-x)) \tag{18}$$

Für den mittleren Bereich II gilt es die Anschlussbedingungen zu anderen Bereichen zu untersuchen. Anschluss von I an II

$$\begin{aligned}
\psi_I(-a) &= \psi_{II}(-a) \qquad \to \alpha\sin(k(b-a)) = Ce^{-qa} + De^{qa} &(19)\\
\frac{d}{dx}\psi_I(-a) &= \frac{d}{dx}\psi_{II}(-a) \qquad \to k\alpha\cos(k(b-a)) = qCe^{-qa} - qDe^{qa} &(20)
\end{aligned}$$

und Anschluss von II an III

$$\begin{aligned}
\psi_{III}(a) &= \psi_{II}(a) \qquad \to \beta\sin(k(b-a)) = Ce^{qa} + De^{-qa} &(21)\\
\frac{d}{dx}\psi_{III}(a) &= \frac{d}{dx}\psi_{II}(-a) \qquad \to -k\beta\cos(k(b-a)) = qCe^{qa} - qDe^{-qa} &(22)
\end{aligned}$$

NR um zu der Beziehung zwischen den Konstanten C und D gelangen: (19) − (21)

$$(\alpha-\beta)\sin(k(b-a)) = Ce^{-qa} + De^{qa} - Ce^{qa} - De^{-qa} \tag{23}$$
$$= C(e^{-qa} - e^{qa}) + D(e^{qa} - e^{-qa}) \tag{24}$$
$$= -2C\sinh(qa) + 2D\sinh(qa) \tag{25}$$
$$= 2(D-C)sinh(qa) \tag{26}$$

$$\Rightarrow (\alpha-\beta)\sin(k(b-a)) = -2(C-D)sinh(qa) \tag{27}$$

(20) + (22)

$$k(\alpha-\beta)\cos(k(b-a)) = qCe^{-qa} - qDe^{qa} + qCe^{qa} - qDe^{-qa} \tag{28}$$
$$= q(C(e^{-qa} + e^{qa}) - D(e^{qa} + e^{-qa}) \tag{29}$$
$$= 2q(C\cosh(qa) - D\cosh(qa) \tag{30}$$
$$= 2q(C-D)cosh(qa) \tag{31}$$

$$\Rightarrow k(\alpha-\beta)\cos(k(b-a)) = 2q(C-D)\cosh(qa) \tag{32}$$

$\frac{(32)}{(27)}$

$$\frac{k(\alpha-\beta)\cos(k(b-a))}{(\alpha-\beta)\sin(k(b-a))} = \frac{2q(C-D)\cosh(qa)}{-2(C-D)\sinh(qa)} \tag{33}$$
$$\frac{k\cos(k(b-a))}{\sin(k(b-a))} = \frac{-q\cosh(qa)}{\sinh(qa)} \tag{34}$$
$$k\cot(k(b-a)) = -q\coth(qa) \tag{35}$$

(19) + (21)

$$(\alpha+\beta)\sin(k(b-a)) = Ce^{-qa} + De^{qa} + Ce^{qa} + De^{-qa} \tag{36}$$
$$= C(e^{-qa} + e^{qa}) + D(e^{qa} + e^{-qa}) \tag{37}$$
$$= -2C\cosh(qa) + 2D\cosh(qa) \tag{38}$$
$$= 2(C+D)\cosh(qa) \tag{39}$$

$$\Rightarrow (\alpha+\beta)\sin(k(b-a)) = 2(C+D)\cosh(qa) \tag{40}$$

(20) − (22)

$$k(\alpha-\beta)\cos(k(b-a)) = qCe^{-qa} - qDe^{qa} - qCe^{qa} + qDe^{-qa} \tag{41}$$
$$= q(C(e^{-qa} - e^{qa}) - D(e^{qa} - e^{-qa}) \tag{42}$$
$$= -2q(C\sinh(qa) - D\sinh(qa) \tag{43}$$
$$= -2q(C+D)\sinh(qa) \tag{44}$$

$$\Rightarrow k(\alpha-\beta)\cos(k(b-a)) = -2q(C+D)\sinh(qa) \tag{45}$$

$\frac{(42)}{(37)}$

$$\frac{k(\alpha-\beta)\cos(k(b-a))}{(\alpha-\beta)\sin(k(b-a))} = \frac{-2q(C+D)\sinh(qa)}{2(C+D)\cosh(qa)} \tag{46}$$
$$\frac{k\cos(k(b-a))}{\sin(k(b-a))} = \frac{-q\sinh(qa)}{\cosh(qa)} \tag{47}$$
$$k\cot(k(b-a)) = -q\tanh(qa) \tag{48}$$

Für <u>gerade</u> Parität ergibt sich: $\frac{(20)}{(19)}$

$$\frac{k\alpha\cos(k(b-a))}{\alpha\sin(k(b-a))} = \frac{qCe^{-qa} - qDe^{qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{49}$$

$$\underbrace{k\cot(k(b-a))}_{(43)} = \frac{qCe^{-qa} - qDe^{qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{50}$$

$$\cancel{q}\tanh(qa) = \cancel{q}\frac{De^{qa} - Ce^{-qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{51}$$

$$\frac{\sinh(qa)}{\cosh(qa)} = \frac{De^{qa} - Ce^{-qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{52}$$

Durch den Vergleich der rechten mit der linken Seite der Gleichung (57) steht jeweils im Nenner und Zähler die Definition von sinh bzw. cosh aber nur für den Fall wenn die Konstanten $C = D$ jeweils gleich sind.

$$\Rightarrow C = D$$

Eins der Konstanten in (19) und (21) einsetzen und die Division daraus $\frac{(19)}{(21)}$:

$$\frac{\alpha\sin(k(b-a))}{\beta\sin(k(b-a))} = \frac{Ce^{-qa} + Ce^{qa}}{Ce^{qa} + Ce^{-qa}} \tag{53}$$

$$\frac{\alpha}{\beta} = 1 \tag{54}$$

$$\tag{55}$$

$$\Rightarrow \alpha = \beta \tag{56}$$

Für die <u>ungerade</u> Parität wird in den Zusammenhang $\frac{(20)}{(19)}$ die Gleichung () eingesetzt:

$$\frac{k\alpha\cos(k(b-a))}{\alpha\sin(k(b-a))} = \frac{qCe^{-qa} - qDe^{qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{57}$$

$$\underbrace{k\cot(k(b-a))}_{()} = \frac{qCe^{-qa} - qDe^{qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{58}$$

$$\cancel{q}\coth(qa) = \cancel{q}\frac{De^{qa} - Ce^{-qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{59}$$

$$\frac{\cosh(qa)}{\sinh(qa)} = \frac{De^{qa} - Ce^{-qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{60}$$

Hier sieht man wieder durch Vergleich dass die Gleichung nur für $C = -D$ erfüllt ist. Daraus ergeben sich α und β $\frac{(19)}{(21)}$:

$$\frac{\alpha\sin(k(b-a))}{\beta\sin(k(b-a))} = \frac{Ce^{-qa} - Ce^{qa}}{Ce^{qa} - Ce^{-qa}} \tag{61}$$

$$\frac{\alpha\sin(k(b-a))}{\beta\sin(k(b-a))} = -C\frac{e^{qa} - e^{-qa}}{e^{qa} - e^{-qa}} \tag{62}$$

$$\frac{\alpha}{\beta} = -1 \tag{63}$$

$$\tag{64}$$

$$\Rightarrow \alpha = -\beta \tag{65}$$