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:

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

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

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

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

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

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

und Anschluss von II an III

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

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)

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

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

$\frac{(45)}{(40)}$

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

Für gerade Parität ergibt sich: $\frac{(20)}{(19)}$

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

$$\underbrace{k\cot(k(b-a))}_{(48)} = \frac{qCe^{-qa} - qDe^{qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{50}$$

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

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

Durch den Vergleich der rechten mit der linken Seite der Gleichung (60) 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 ungerade Parität wird in den Zusammenhang $\frac{(20)}{(19)}$ die Gleichung (35) eingesetzt:

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

$$\underbrace{k\cot(k(b-a))}_{(35)} = \frac{qCe^{-qa} - qDe^{qa}}{Ce^{-qa} + De^{qa}} \tag{58}$$

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

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

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

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

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

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

$$\tag{64}$$

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

1.0.1 Zusammenfassung der Zwischenlösung:

Für die gerade Parität gilt für $\alpha = \beta$ und $C = D$ mit der transzendalen Gleichung (48):

$$\boxed{k \cot(k(b-a)) = -q \tanh(qa)} \tag{66}$$

Somit gilt für die Wellengleichung:

$$\psi_I = \alpha \sin(k(x+b)) \qquad \text{mit } k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}E} \tag{67}$$

$$\psi_{II} = C \cosh(qx) \qquad \text{mit } q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(V-E)} \tag{68}$$

$$\psi_{III} = \alpha \sin(k(b-x)) \tag{69}$$

Für die ungerade Parität gilt für $\alpha = -\beta$ und $C = -D$ mit der transzendalen Gleichung (35):

$$\boxed{k \cot(k(b-a)) = -q \coth(qa)} \tag{70}$$

somit gilt für die Wellengleichung:

$$\psi_I = \alpha \sin(k(x+b)) \qquad \text{mit } k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}E} \tag{71}$$

$$\psi_{II} = C \sinh(qx) \qquad \text{mit } q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(V-E)} \tag{72}$$

$$\psi_{III} = -\alpha \sin(k(b-x)) \tag{73}$$

1.1 Näherung für kleine Energien

Für kleine Energien (d.h. $E << V_0$ und $k << q$ und möglichst breite Barriere (d.h. $qa >> 1$) kann man folgende Näherung aufstellen:

$$tanh(qa) = \frac{e^{qa} - e^{-qa}}{e^{qa} + e^{-qa}} \qquad | \cdot \frac{e^{-qa}}{e^{-qa}} \tag{74}$$

$$= \frac{1 - e^{-2qa}}{1 + e^{-2qa}} \qquad | \cdot \frac{1 - e^{-2qa}}{1 - e^{-2qa}} \tag{75}$$

$$= \frac{(1 - e^{-2qa})^2}{1^2 + e^{-4qa}} \tag{76}$$

$$= \frac{1 - 2e^{-2qa} + e^{-4qa}}{1^2 + e^{-4qa}} \tag{77}$$

Für große $qa >> 1$ kann der Therm e^{-4qa} vernachlässigt werden. Für den Tangens Hyperbolicus ergibt sich:

$$\tanh(qa) \approx 1 - 2e^{-2qa} \tag{78}$$

und analog für den Cosinus Hyperbolicus:

$$\cosh(qa) \approx 1 + 2e^{-2qa} \tag{79}$$

Die Transzendenten Gleichungen (66) und (67) werden dann zu:

$$\cot(k(b-a)) = -\frac{q}{k} \tanh(qa) = -\frac{q}{k} \coth(qa) \tag{80}$$

Es ist geschickter mit dem Kehrwert der Gleichung (80) weiterzumachen:

$$\tan(k(b-a)) = -\frac{k}{q} \coth(qa) = -\frac{k}{q} \tanh(qa) \tag{81}$$

Nun können die Approximationen (78) und (79) eingesetzt werden:

$$\tan(k(b-a)) \approx -\frac{k}{q}(1+2e^{-2qa}) \approx -\frac{k}{q}(1-2e^{-2qa}) \tag{82}$$

Zusammengefasst lässt sich diese Gleichung (82) schreiben

$$\tan(k(b-a)) \approx -\frac{k}{q} \mp \frac{k}{q}2e^{-2qa} \tag{83}$$

Wobei − für die gerade Parität und + für ungerade Parität steht. Im Falle von einer unendlich hohen Barriere gibt es keine Tunnelung und man erhält zwei separate Teilchenpotentiale. Das ist wenn $\frac{k}{q} \to 0$ oder q sehr groß wird. Aus der Gleichung (83) sieht man leicht, dass:

$$\tan(k^{\frac{k}{q}\to 0}(b-a)) \approx 0 \tag{84}$$

Die Einschränkung (84) bedeutet für den Argument des Tangens, dass es gleich ist einem ganzzahligen vielfachen von π also:

$$k^{\frac{k}{q}\to 0}(b-a) \approx n\pi \qquad n \in \mathbb{N}_0 \tag{85}$$

In diesen Fällen kann die Barriere nicht durchtunnelt werden und man erhält das schon bekannte Energiespektrum:

$$E^{\frac{k}{q}\to 0} \approx \frac{\hbar^2(k^{\frac{k}{q}\to 0})^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(b-a)^2}n^2 \tag{86}$$