Stetigkeit der Ableitung bei $x = \pm\frac{L}{2}$:

- $\psi_E^{I}(-\frac{L}{2})' = \psi_E^{II}(-\frac{L}{2})' \Leftrightarrow \varkappa A e^{-\varkappa\frac{L}{2}} = ik\left(F e^{-ik\frac{L}{2}} - G e^{+ik\frac{L}{2}}\right)$ (iii)
- $\psi_E^{II}(\frac{L}{2})' = \psi_E^{III}(\frac{L}{2})' \Leftrightarrow ik\left(F e^{ik\frac{L}{2}} - G e^{-ik\frac{L}{2}}\right) = -\varkappa D e^{-\varkappa\frac{L}{2}}$ (IV)

(Normierung $\int|\psi|^2 = \int_{-\infty}^{-L/2}|\psi^I|^2 + \int_{-L/2}^{L/2}|\psi^{II}|^2 + \int_{L/2}^{\infty}|\psi^{III}|^2 = 1$ liefert weitere Gl. (V))

5 Gl. 5 Koeff. A, D, F, G, E

* Um die Lösungen einfacher zu finden bzw. zu klassifizieren benutzen wir eine Symmetrie dieser Schrödi unter $\boxed{\text{Parität } P: x \to -x}$

- Wegen $V(x) = V(-x)$ gilt für dieses Problem (und andere mit derselben Symmetrie):

$$E\psi_E(x) = \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]}_{H}\psi_E(x) \overset{x\to -x}{\Rightarrow} \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d(-x)^2} + V(-x)\right]}_{\text{ebenfalls } \hat{=}\, H \text{ wegen Symmetrie}}\psi_E(-x) = E\psi_E(-x)$$

wobei $\psi_E(x)$ bereits eine Lösung von $H\psi_E(x) = E\psi_E(x)$ ist,

$\Rightarrow$ zu jeder Lösung $\psi_E(x)$ mit Energie E gibt es bei symm. Potentialen immer eine Lösung $\psi_E(-x)$ zur selben Energie E!

- mit $\psi_E(\pm x)$ ist auch $\psi_E(+x) \pm \psi_E(-x)$ eine Lösung (Superpos.!)

$\exists$ 2 Fälle: 1) die Energie E ist nicht entartet, d.h. kommt genau 1x vor $\Rightarrow$ $\psi_E(x) + \psi_E(-x)$ oder $\psi_E(x) - \psi_E(-x)$ ist identisch 0 ($H0 = E0$ gilt immer, ist keine Eigenfunktion!)

2) die Energie E ist entartet, d.h. $\psi_E(x) \pm \psi_E(-x)$ beide $\neq 0$ und sogar linear unabhängig, und sind gerade/ungerade

$\to$ In jedem Fall macht es Sinn, für symmetrische $V(x)$ die Lösungen mit gerader Parität $\psi(x) = +\psi(-x)$ und ungerader Parität $\psi(x) = -\psi(-x)$ getrennt zu betrachten!

* Gerade (= symmetrische) Lösungen:

- $\psi_E^{I}(-x) = \psi_E^{III}(+x)$: $\quad \psi_E^{I}(-x) = A e^{\varkappa(-x)} \overset{!}{=} D e^{-\varkappa x} \quad \forall x > \frac{L}{2}$

$\forall x > \frac{L}{2}$ $\quad$ d.h. $\underline{A = D}$

sowie $\varphi_E^{II}(-x) = \varphi_E^{II}(x)$: $F e^{-ikx} + G e^{+ikx} \overset{!}{=} F e^{ikx} + G e^{-ikx}$ $\forall |x| \leq \frac{L}{2}$

für $-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$ d.h. $\underline{F = G}$ (haben 2 Koeff. bestimmt)

$\Rightarrow$ (i) impliziert (ii), und (iii) impliziert (iv), d.h. 2 Gl. bleiben übrig.

(i) $A e^{-\varkappa \frac{L}{2}} = F \, 2\cos(k\frac{L}{2})$, für $k\frac{L}{2} \neq \frac{\pi}{2} + 2\pi n$ $n \in \mathbb{N}$

(iii) $\varkappa A e^{-\varkappa \frac{L}{2}} = F \, 2\sin(k\frac{L}{2})$ können wir durch (i) teilen $\Rightarrow A, F$ kürzen sich

$$\Rightarrow \boxed{\varkappa = k\frac{\sin(k\frac{L}{2})}{\cos(k\frac{L}{2})}} \Leftrightarrow \boxed{\sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)} \tan\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)}\,\frac{L}{2}\right)}$$

dies ist eine transzendente Gleichung nur für E für gegebenes L, m, V_0

$\Rightarrow$ Lösung(en) für E. Diese lassen sich numerisch oder zumindestens qualitativ graphisch bestimmen, s.u.

- Einsetzen von E in (i) oder (iii) bestimmt $A \Leftrightarrow F$, (v) die verbleibende Größe.

* Ungerade (= antisymmetrische) Lösungen:

- $\varphi_E^{I}(-x) \overset{!}{=} -\varphi_E^{III}(+x) \Leftrightarrow A e^{\varkappa(-x)} \overset{!}{=} -D e^{-\varkappa x}$ $\forall x > \frac{L}{2}$

d.h. $\underline{A = -D}$

- $\varphi_E^{II}(-x) \overset{!}{=} -\varphi_E^{II}(+x) \Leftrightarrow F e^{-ikx} + G e^{+ikx} = -(F e^{ikx} + G e^{-ikx})$ $\forall |x| \leq \frac{L}{2}$

d.h. $\underline{F = -G}$ (haben 2 Koeff. best.)

und (i) $\Rightarrow$ (ii), (iii) $\Rightarrow$ (iv)

und (i) $A e^{-\varkappa\frac{L}{2}} = F(-2i)\sin(k\frac{L}{2})$ $k\frac{L}{2} \neq 2\pi n$, für $n \in \mathbb{N}$

(iii) $\varkappa A e^{-\varkappa\frac{L}{2}} = 2ikF\cos(k\frac{L}{2})$

$$\Rightarrow \boxed{\varkappa = -k\cot(k\frac{L}{2})} \Leftrightarrow \boxed{\sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}\left(-\cot\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)}\,\frac{L}{2}\right)\right)}$$

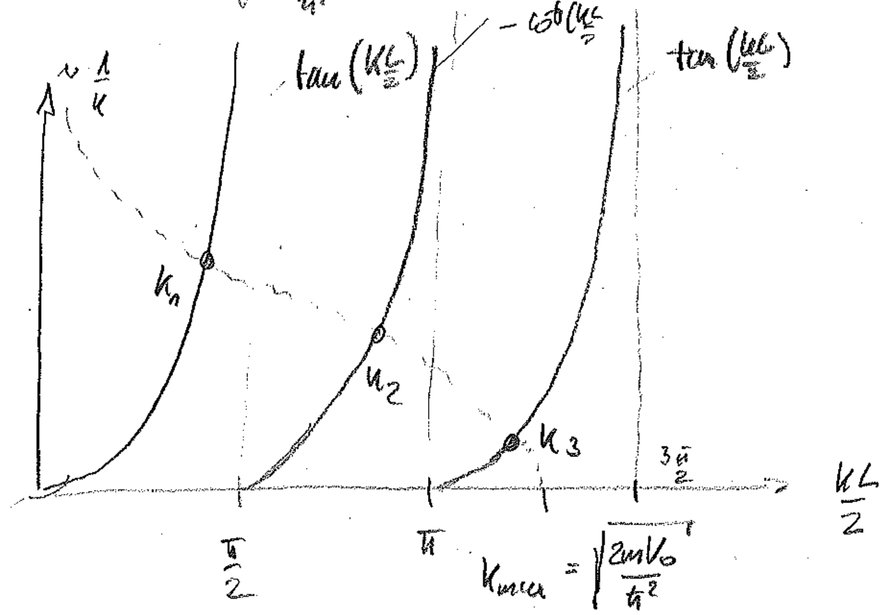
andere transzendente Gl., die für E gelöst werden muss

- best. A, F wie oben

Graphische Lösung der transzendenten Gleichungen:

$$\frac{\varkappa}{k} = \begin{cases} \tan\left(k\frac{L}{2}\right) & \text{gerades } \psi \\ -\cot\left(k\frac{L}{2}\right) & \text{ungerades } \psi \end{cases} \qquad k^2 = \frac{(E+V_0)2m}{\hbar^2}$$

linke Seite $\frac{\varkappa}{k} = \frac{\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}}{\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}} = \sqrt{\frac{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} - 1} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1}$ als Fkt von k



Beispiel

$\Rightarrow$ hier gibt es 3 Lösungen für $k_{1,2,3} \Leftrightarrow$ 3 Lsg für $E_{1,2,3} = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} - V_0 < 0$ wo linke und rechte Seite gleich sind.

davon sind 2 gerade und 1 ungerade in diesem Beispiel

mit $E_1 < E_2 < E_3$

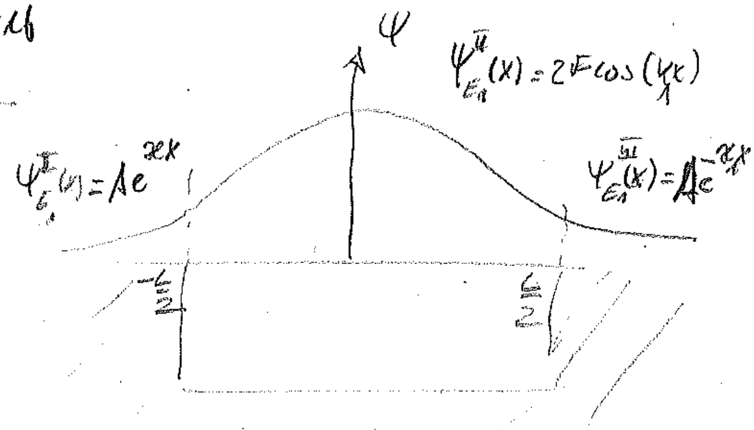
dieses alternierende Verhalten ist typisch, s.u.

Allgemein: 1) das Energiespektrum ist diskret und es gibt genau n Lösungen, wobei $(n-1)\frac{\pi}{2} \leq \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar}} < n \cdot \frac{\pi}{2}$ in Abhängigkeit von m, V_0 und L, die gegeben sind

2) Für beliebig kleines V_0 mit $\sqrt{\frac{2m}{\hbar}V_0} < \frac{\pi}{2}$ und $L>0$ gibt es immer eine Lösung, durch den Schnittpunkt mit $\tan\left(\frac{kL}{2}\right)$ gegeben, d.h. sie ist immer gerade! (1. Kurve)

(auch wenn es mehrere Lsg. gibt)

3) die Lösung mit den kleinsten k_1 und damit der kleinsten Energie E_1 ist immer gerade (Schnitt mit $\tan(\frac{kL}{2})$) und bildet den Grundzustand; sie hat keine Nullstelle (keinen Knoten) da $\boxed{\frac{k_1 L}{2} < \frac{\pi}{2}}$ gilt



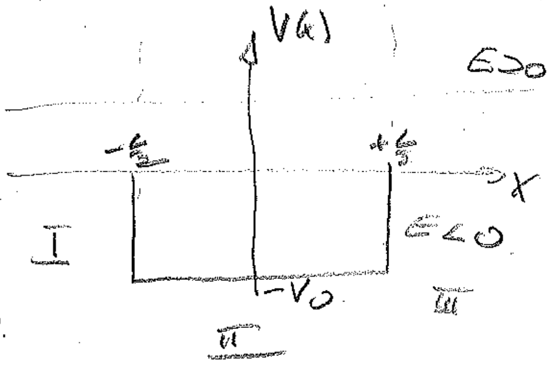
4) auch im klassisch verbotenen Bereich $|x| < \frac{L}{2}$ in $E<0$ ist $\psi^{I,III}(x) \neq 0$, wenn gleich exponentiell klein!

5) ohne Beweis: die Wellenfunktion zu Energie E_l hat l Knoten, $E_1 < E_2 < \dots < E_l < \dots < E_n$

und es gilt $\psi_{E_l}(-x) = (-)^l \psi_{E_l}(x)$, d.h. gerade und ungerade ψ wechseln sich ab.

2.2. Streuung am Kastenpotential [Münster 3.2.2.]

Wir betrachten nun mögliche Lösungen der zeitunabh. Schrödi mit $\boxed{E>0}$. Wir erwarten nun keine gebundenen sondern Streuzustände.



Bereich I: $x < -\frac{L}{2}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_E^I(x) = E\psi_E^I(x)$$

wegen $E>0$ ist nun $E = +\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} > 0$

d.h. eine geeignete Parametrisierung ist, $k_0 > 0$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_E^I(x)'' = -k_0^2\,\psi_E^I(x)}$$