

## IV.1.2 Streuzustände

In diesem Abschnitt wollen wir jetzt die Streuzustände, d.h. die Eigenfunktionen der stationären Schrödinger-Gleichung (IV.1) mit positiver Energie  $E > 0$ , für das Kastenpotential (IV.2) untersuchen. Wie im vorigen Abschn. IV.1.2 bleibt  $k > 0$  durch Gl. (IV.6) gegeben. Dazu wird noch  $k_0 > 0$  durch

$$E \equiv \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \quad \text{mit } k_0 > 0 \quad (\text{IV.14})$$

definiert.

### IV.1.2a Wellenfunktionen

Der allgemeinen Strategie nach werden erstens Lösungen von Gl. (IV.1) in den drei Gebieten I, II, III gesucht, wo das Potential konstant ist.

- Im Bereich I verschwindet das Potential, so dass die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} = E \psi_E(x) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} = -k_0^2 \psi_E(x)$$

lautet. Die allgemeine Lösung dieser Differentialgleichung ist eine lineare Superposition aus ebenen Wellen  $e^{ik_0 x}$  und  $e^{-ik_0 x}$ :

$$\psi_E(x) = A e^{ik_0 x} + B e^{-ik_0 x} \quad \text{mit } A, B \in \mathbb{C} \quad \text{für } x < -\frac{L}{2}. \quad (\text{IV.15})$$

Diese Wellenfunktion wird nicht normierbar sein, denn sie ist nicht quadratintegrierbar. Streng genommen beschreibt sie also keinen physikalischen Zustand.

Nichtsdestotrotz nimmt die in § ?? definierte Wahrscheinlichkeitsstromdichte eine physikalisch sinnvolle Form an. In diesem stationären eindimensionalen Problem wird Definition (??) zu

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[ \psi_E(x)^* \frac{d\psi_E(x)}{dx} \right] \vec{e}_x,$$

d.h.

$$\begin{aligned} \vec{j} &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[ (A^* e^{-ik_0 x} + B^* e^{ik_0 x}) i k_0 (A e^{ik_0 x} - B e^{-ik_0 x}) \right] \vec{e}_x \\ &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[ i k_0 (|A|^2 - |B|^2 + AB^* e^{2ik_0 x} - A^* B e^{-2ik_0 x}) \right] \vec{e}_x. \end{aligned}$$

Dabei sind die zwei letzten Terme in den Klammern konjugiert zu einander, d.h. ihre Differenz ist rein imaginär, während die zwei ersten reell sind, was zu

$$\vec{j} = \frac{\hbar k_0}{m} |A|^2 \vec{e}_x - \frac{\hbar k_0}{m} |B|^2 \vec{e}_x \quad (\text{IV.16})$$

führt. Dabei hat  $\hbar k_0/m$  die Dimension einer Geschwindigkeit, so dass man gerne den ersten Term als einen nach rechts — d.h. nach den positiven  $x$ -Werten — propagierenden „Strahl“ interpretieren möchte, und dementsprechend den zweiten als einen nach links laufenden Strahl.

### Bemerkungen:

\* Die Einführung eines Teilchenstrahls in der Interpretation, obwohl die Schrödinger-Gleichung für ein einziges Teilchen geschrieben wird, spiegelt den impliziten Bezug der Bornschen Regel (III.3) auf ein Ensemble von Teilchen, die im gleichen Zustand präpariert werden, wider. Eigentlich schlug Born seine Interpretation der Wellenfunktion vor, als er die Schrödinger-Gleichung für einen Streuprozess in drei Raumdimensionen lösen wollte [5].

\* Dazu ist anzumerken, dass die stationäre Schrödinger-Gleichung (IV.1) streng genommen nicht die Bewegung dieser Teilchen beschreibt — die gesuchten Lösungen sind ja zeitunabhängig! Stattdessen stellt ein solcher Streuzustand eher die stationäre, stetige „Wahrscheinlichkeitsströmung“ dar,

die die Reihenfolge der sukzessiven quadrierten Wellenfunktionen eines normierbaren Wellenpakets zusammenfasst, das aus  $x \rightarrow -\infty$  auf den Potentialtopf kommt und dort gestreut wird. Im eindimensionalen Problem dieses Abschnitts sind die möglichen Ergebnisse des Streuprozesses entweder Reflexion (nach hinten) oder Transmission (nach vorne).

- Im Gebiet III nimmt wieder die stationäre Schrödinger-Gleichung die Form

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} = E\psi_E(x) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} = k_0^2\psi_E(x)$$

an, deren allgemeinen Lösung die Überlagerung aus rechts- und linkslaufenden ebenen Wellen

$$\psi_E(x) = C e^{ik_0x} + D e^{-ik_0x} \quad \text{mit } C, D \in \mathbb{C} \quad \text{für } x > \frac{L}{2}$$

ist.

Um das Problem zu vereinfachen, stellen wir uns ein bestimmtes Experiment vor, in dem ein Teilchenstrahl von links ( $x \rightarrow -\infty$ ) ankommt und nach rechts propagiert: dann ist  $|A|$  die Amplitude der auf den Potentialtopf *einlaufenden Welle*. Die Teilchen durchqueren das Potential und propagieren weiter nach rechts, entsprechend dem Beitrag  $C e^{ik_0x}$ , wobei  $|C|$  die Amplitude der *transmittierten Welle* ist. Am Potentialtopf könnte — auch wenn das für die klassische Intuition überraschend ist — teil des Strahls am reflektiert werden: dieser *reflektierten Welle* entspricht der Beitrag  $B e^{-ik_0x}$  in Gl. (IV.15) mit der Amplitude  $|B|$ . Wir nehmen aber an, dass keine Teilchen aus  $+\infty$  kommen und nach links propagieren, d.h.  $D = 0$ . Deshalb untersuchen wir Lösungen, die im Bereich III der Form

$$\psi_E(x) = C e^{ik_0x} \quad \text{mit } C \in \mathbb{C} \quad \text{für } x > \frac{L}{2} \quad (\text{IV.17})$$

sind.

- Im Gebiet II wird die stationäre Schrödinger-Gleichung zu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} - V_0\psi_E(x) = E\psi_E(x) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} = -k^2\psi_E(x)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$\psi_E(x) = F e^{ikx} + G e^{-ikx} \quad \text{mit } F, G \in \mathbb{C} \quad \text{für } -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}. \quad (\text{IV.18})$$

**Bemerkung:** Das betrachtete Experiment, in der das Teilchen von  $-\infty$  auf das Potential kommt, ist nicht symmetrisch unter dem Austausch von  $x$  und  $-x$ , was sich z.B. im Ansatz  $D = 0$  bei  $A \neq 0$  widerspiegelt. Dementsprechend wird in diesem Abschnitt nicht nach Lösungen mit bestimmter Symmetrie gesucht.

Um die partiellen Lösungen (IV.15), (IV.17) und (IV.18) aneinander zu kleben, fordert man wieder die Stetigkeit der Wellenfunktion  $\psi_E$  und deren Ableitung  $\psi'_E$  in  $x = \pm L/2$ . Somit gelten die vier Anschlussbedingungen

$$\bullet \quad \psi_E\left(-\frac{L^-}{2}\right) = \psi_E\left(-\frac{L^+}{2}\right) \quad \text{d.h.} \quad A e^{-ik_0L/2} + B e^{ik_0L/2} = F e^{-ikL/2} + G e^{ikL/2} \quad (\text{IV.19a})$$

$$\bullet \quad \psi'_E\left(-\frac{L^-}{2}\right) = \psi'_E\left(-\frac{L^+}{2}\right) \quad \text{d.h.} \quad ik_0(A e^{-ik_0L/2} - B e^{ik_0L/2}) = ik(F e^{-ikL/2} - G e^{ikL/2}) \quad (\text{IV.19b})$$

$$\bullet \quad \psi_E\left(\frac{L^+}{2}\right) = \psi_E\left(\frac{L^-}{2}\right) \quad \text{d.h.} \quad C e^{-ik_0L/2} = F e^{ikL/2} + G e^{-ikL/2} \quad (\text{IV.19c})$$

$$\bullet \quad \psi'_E\left(\frac{L^+}{2}\right) = \psi'_E\left(\frac{L^-}{2}\right) \quad \text{d.h.} \quad ik_0 C e^{-ik_0L/2} = ik(F e^{ikL/2} - G e^{-ikL/2}). \quad (\text{IV.19d})$$

Dabei bleiben für jede Energie  $E$  noch fünf unbekannte Koeffizienten  $A, B, C, F, G$ , wofür es nur vier (lineare) Gleichungen gibt: es wird immer eine Lösung geben, unabhängig vom Wert von  $E$ , d.h. die Energie darf beliebig sein.

Die Gleichungen (IV.19c) und (IV.19d) bilden ein System von zwei linearen Gleichungen für die zwei unbekanntes  $F$  und  $G$ :

$$\begin{pmatrix} e^{ikL/2} & e^{-ikL/2} \\ e^{ikL/2} & -e^{-ikL/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C e^{ik_0L/2} \\ C \frac{k_0}{k} e^{-ik_0L/2} \end{pmatrix}.$$

Durch Inversion dieses Systems kann man  $F$  und  $G$  durch  $C$  ausdrücken:

$$F = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{k_0}{k} \right) C e^{i(k_0-k)L/2}, \quad G = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{k_0}{k} \right) C e^{i(k_0+k)L/2}. \quad (\text{IV.20})$$

Diese Koeffizienten lassen sich in die Gl. (IV.19a) und (IV.19b) einsetzen, die jeweils zu

$$\begin{aligned} A e^{-ik_0L/2} + B e^{ik_0L/2} &= \frac{C e^{ik_0L/2}}{2} \left[ \left( 1 + \frac{k_0}{k} \right) e^{-ikL} + \left( 1 - \frac{k_0}{k} \right) e^{ikL} \right] \\ &= C e^{ik_0L/2} \left[ \cos(kL) - i \frac{k_0}{k} \sin(kL) \right] \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} A e^{-ik_0L/2} - B e^{ik_0L/2} &= \frac{C e^{ik_0L/2}}{2} \left[ \left( 1 + \frac{k}{k_0} \right) e^{-ikL} - \left( \frac{k}{k_0} - 1 \right) e^{ikL} \right] \\ &= C e^{ik_0L/2} \left[ \cos(kL) - i \frac{k}{k_0} \sin(kL) \right] \end{aligned}$$

werden. Diese Gleichungen bilden wieder ein lineares System für  $A$  und  $B$ , dessen Lösung

$$A = C e^{ik_0L} \left[ \cos(kL) + \left( \frac{k_0}{k} + \frac{k}{k_0} \right) \frac{\sin(kL)}{2i} \right], \quad B = C \left( \frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right) \frac{\sin(kL)}{2i} \quad (\text{IV.21})$$

ist. Somit lassen sich alle Koeffizienten in Gl. (IV.15), (IV.17), (IV.18) durch einen davon ausdrücken. Insbesondere merkt man, dass  $B$  im Allgemeinen nicht Null ist, wenn  $A$  — und daher  $C$  — nicht verschwindet, d.h. dass die reflektierte Welle mitberücksichtigt werden muss.

### IV.1.2b Reflexions- und Transmissionskoeffizienten

Anhand der Gl. (IV.21) kann man jetzt den *Reflexionskoeffizienten*

$$R \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad (\text{IV.22a})$$

und den *Transmissionskoeffizienten*

$$T \equiv \frac{|C|^2}{|A|^2} \quad (\text{IV.22b})$$

bestimmen. Das erstere bzw. letztere misst den relativen Anteil der (quadrierten) Amplitude der einlaufenden Welle, der reflektiert bzw. transmittiert wird. Aus Gl. (IV.21) folgen nämlich

$$\begin{aligned} \frac{|A|^2}{|C|^2} &= \cos^2(kL) + \left( \frac{k}{k_0} + \frac{k_0}{k} \right)^2 \frac{\sin^2(kL)}{4} = \cos^2(kL) + \frac{(k^2 + k_0^2)^2}{4k^2k_0^2} \sin^2(kL) \\ &= 1 + \frac{(k^2 - k_0^2)^2}{4k^2k_0^2} \sin^2(kL) = 1 + \left( \frac{k}{k_0} - \frac{k_0}{k} \right)^2 \frac{\sin^2(kL)}{4} \end{aligned}$$

und

$$\frac{|B|^2}{|C|^2} = \left( \frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right)^2 \frac{\sin^2(kL)}{4}.$$

Somit lautet der Reflexionskoeffizient

$$R = \frac{\left(\frac{k}{k_0} - \frac{k_0}{k}\right)^2 \frac{\sin^2(kL)}{4}}{1 + \left(\frac{k}{k_0} - \frac{k_0}{k}\right)^2 \frac{\sin^2(kL)}{4}} \quad (\text{IV.23a})$$

und der Transmissionskoeffizient

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k}{k_0} - \frac{k_0}{k}\right)^2 \frac{\sin^2(kL)}{4}}. \quad (\text{IV.23b})$$

Beide sind offensichtlich kleiner als 1 und sie erfüllen

$$T + R = 1, \quad (\text{IV.24})$$

was die Erhaltung der gesamten Wahrscheinlichkeit ausdrückt. Dank der letzteren Gleichung können wir uns mit der Untersuchung des Verhaltens des Transmissionskoeffizienten begnügen.

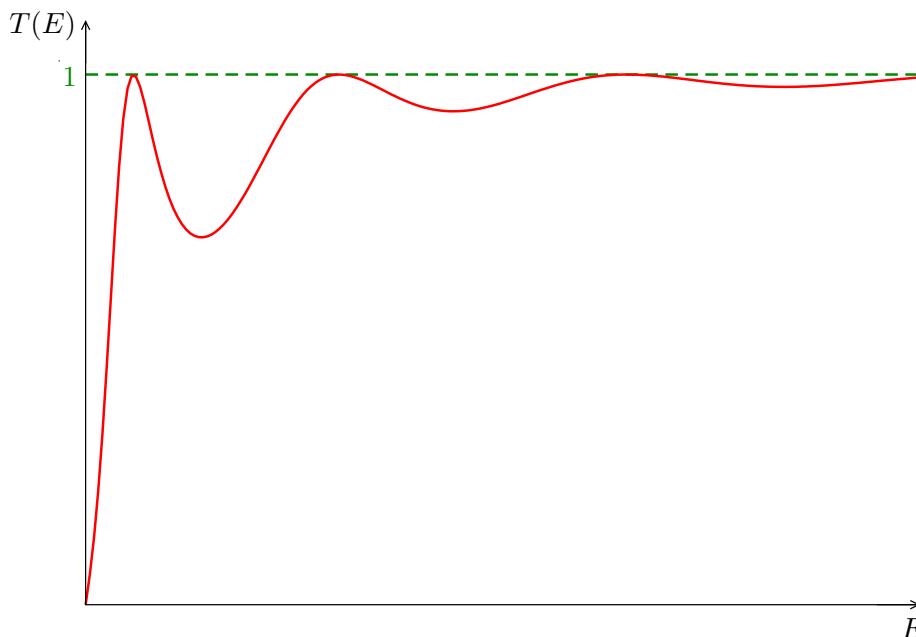
Unter Nutzung der Definitionen (IV.6) und (IV.14) kommt

$$\left(\frac{k}{k_0} - \frac{k_0}{k}\right)^2 = \frac{(k_0^2 - k^2)^2}{k_0^2 k^2} = \frac{V_0^2}{E(E + V_0)},$$

woraus die Abhängigkeit des Transmissionskoeffizienten von der Energie der Lösung folgt:

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2(kL)} \quad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}. \quad (\text{IV.25})$$

Diese Funktion von  $E$  wird in Abb. IV.3 dargestellt. Der Transmissionskoeffizient  $T(E)$  nimmt tendenziell mit  $E$  und geht asymptotisch zu 1 bei hohen Energien. Physikalisch ist dieses mathematische Verhalten sinnvoll: ein Teilchen mit Energie  $E \gg V_0$  „sieht“ den Potentialtopf nicht und fliegt dadurch, ohne gestört zu werden.



**Abbildung IV.3** – Energieabhängigkeit des Transmissionskoeffizienten (IV.25).

Am Plot merkt man auch, dass der Transmissionskoeffizient  $T(E)$  auch für bestimmte endliche Werte der Energie  $E$  Null wird, wenn der Sinus-Term im Nenner der Gl. (IV.25) verschwindet, und zwar für  $kL = n\pi$  mit  $n \in \mathbb{N}^*$ , d.h.

$$E = -V_0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad \text{mit } n = 1, 2, \dots \quad (\text{IV.26})$$

Für eine solche Energie findet eine *Resonanz* statt, und das Potential ist „transparent“ für die einfallende Welle: alles wird transmittiert ( $T = 1$ ) bzw. nichts wird reflektiert ( $R = 0$ ) — wie man auch direkt am Ausdruck von  $B$  [Gl. (IV.21)] sieht.

Für  $kL = n\pi$  ist  $2L$  ein Vielfaches der Wellenlänge  $\lambda = 2\pi/k$  der Wellenfunktion (IV.18) im Bereich II. Dementsprechend „passt“ die letztere genau im Potentialtopf, d.h. deren Werte an den Rändern, die entweder in Phase oder um  $\pi$  phasenverschoben sind, haben den gleichen Betrag:  $|\psi_E(L/2)| = |\psi_E(-L/2)|$  — was genau äquivalent zu  $T = 1$  ist.

Alternativ kann man sich vorstellen, dass die bei  $x = -L/2$  und  $x = L/2$  reflektierten Wellen destruktiv im Bereich I interferieren.

**Bemerkung:** Interessanterweise stellt Gl. (IV.26) eine Art Quantisierung der Energiewerte dar — hier gibt es Resonanz nur für abzählbar viele Werte von  $E$  —, ähnlich wie bei den gebundenen Zuständen.