Стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Рассмотрим рассеяние частиц, этому соответствует положительная энергия $E > 0$. Будем считать, что частицы налетают на потенциальную яму слева. Этой ситуации для заданного потенциала соответствует решение уравнения Шредингера вида:

$$\psi(x) = e^{ik(x+a)} \ + \ \alpha e^{-ik(x+a)}, \quad \text{при} \quad x \leq -a,$$

$$\psi(x) = \beta e^{ik_1 x} \ + \ \gamma e^{-ik_1 x}, \quad \text{при} \quad -a \leq x \leq a,$$

$$\psi(x) = \delta e^{ik(x-a)} \quad \text{при} \quad a \geq x.$$

Волновая функция определяется с точностью до умножения на постоянный фазовый множитель, выше мы распорядились этим произволом и выбрали функцию в виде удобном для дальнейшего написания уравнений. Параметры k и k_1 имеют вид:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \qquad k_1 = \sqrt{\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}}.$$

Коэффициенты α, β, γ, δ определяются из условия непрерывности волновой функции и ее первой производной в точках $x = -a$ и $x = a$.

Непрерывность волновой функции в точке $-a$ накладывает условие:

$$1 + \alpha = \beta e^{-ik_1 a} \ + \ \gamma e^{ik_1 a},$$

а непрерывность производной:

$$ik(1-\alpha) = ik_1(\beta e^{-ik_1 a} \ - \ \gamma e^{ik_1 a})$$

Перепишем эти уравнения в виде

$$2\beta e^{-ik_1 a} = \left(1 + \frac{k}{k_1}\right) \ + \ \left(1 - \frac{k}{k_1}\right)\alpha,$$

$$2\gamma e^{ik_1 a} = \left(1 - \frac{k}{k_1}\right) \ + \ \left(1 + \frac{k}{k_1}\right)\alpha.$$

Непрерывность волновой функции и ее производной в точке a накладывает условия

$$\delta = \beta e^{ik_1 a} \ + \ \gamma e^{-ik_1 a},$$

и

$$ik\delta = ik_1(\beta e^{ik_1 a} \ - \ \gamma e^{-ik_1 a}).$$

Эти уравнения перепишем в виде

$$2\beta e^{ik_1 a} = \left(1 + \frac{k}{k_1}\right)\delta,$$

$$2\gamma e^{-ik_1a} = \left(1 - \frac{k}{k_1}\right)\delta.$$

Теперь для каждого из коэффициентов β и γ есть по два выражения. Исключаем β и γ, получаем два уравнения для определения α и δ:

$$e^{-ik_1a}\left(1 + \frac{k}{k_1}\right)\alpha \;-\; e^{ik_1a}\left(1 - \frac{k}{k_1}\right)\delta \;=\; -e^{-ik_1a}\left(1 - \frac{k}{k_1}\right),$$

и

$$e^{ik_1a}\left(1 - \frac{k}{k_1}\right)\alpha \;-\; e^{-ik_1a}\left(1 + \frac{k}{k_1}\right)\delta \;=\; -e^{ik_1a}\left(1 + \frac{k}{k_1}\right).$$

Эта линейная неоднородная система уравнений. Может быть решена, например, с помощью обратной матрицы. При этом получаем явные выражения для коэффициентов α и δ:

$$\alpha = -\frac{2i\sin(2k_1a)}{\det}\left(1 - \left(\frac{k}{k_1}\right)^2\right),$$

$$\delta = -\frac{4k}{k_1 \det},$$

где det — определитель матрицы, соответствующей решаемой системе уравнений, он имеет вид

$$\det = 2i\sin(2k_1a)\left(1 + \left(\frac{k}{k_1}\right)^2\right) \;-\; \frac{4k}{k_1}\cos(2k_1a).$$

Плотность потока частиц определяется по формуле

$$j = \frac{i\hbar}{2m}(\psi(x)\psi'^*(x) \;-\; \psi'(x)\psi^*(x)).$$

При $x < -a$ плотность потока частиц равна

$$j = \frac{\hbar k}{m} \;-\; \frac{\hbar k}{m}|\alpha|^2.$$

Первое слагаемое — плотность потока налетающих на яму частиц, второе — плотность потока отраженных частиц. Поэтому коэффициент отражения R равен:

$$R = |\alpha|^2 = \frac{4\sin^2(2k_1a)\left(1 - \left(\frac{k}{k_1}\right)^2\right)}{4\sin^2(2k_1a)\left(1 + \left(\frac{k}{k_1}\right)^2\right) + 16\left(\frac{k}{k1}\right)^2\cos^2(2k_1a)}.$$

А при $x > a$ плотность потока частиц равна

$$j = \frac{\hbar k}{m}|\delta|^2.$$

Поэтому коэффициент прохождения D равен:

$$D = |\delta|^2 = \frac{16\left(\frac{k}{k_1}\right)^2}{4\sin^2(2k_1 a)\left(1+\left(\frac{k}{k_1}\right)^2\right) + 16\left(\frac{k}{k1}\right)^2\cos^2(2k_1 a)}.$$

Рассмотрим теперь вопрос о состояниях с отрицательной энергией (связанные состояния). Во всех выкладках выше на самом деле положительность E использовалась только когда параметры k и k_1 считались вещественными при нахождении коэффициентов D и R. Будем теперь считать, что $E < 0$ и $E > -U_0$. В этом случае параметр k_1 останется вещественным, а параметр k станет мнимым:

$$k = i\kappa, \qquad \kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0.$$

Волновая функция, с которой мы начали рассмотрение, примет при отрицательных E вид:

$$\psi(x) = e^{-\kappa(x+a)} \ + \ \alpha e^{\kappa(x+a)}, \quad \text{при} \quad x \le -a,$$
$$\psi(x) = \beta e^{ik_1 x} \ + \ \gamma e^{-ik_1 x}, \quad \text{при} \quad -a \le x \le a,$$
$$\psi(x) = \delta e^{-\kappa(x-a)} \quad \text{при} \quad a \ge x.$$

Эта функция является формальным решением уравнения Шредингера при отрицательной энергии E. Однако, первое слагаемое в выражении для волновой функции при $x < -a$ бесконечно растет при $x \to -\infty$, и если коэффициенты α, β, γ и δ конечны, то полученному формальному решению не соответствует никакое физическое состояние. Если же коэффициенты α, β, γ и δ стремятся к бесконечности при приближении к некоторому отрицательному значению энергии, то после деления, например, на коэффициент α "неправильное"слагаемое становится пренебрежимо малым и мы получаем нормируемую волновую функцию, соответствующую связанному состоянию. Из приведенного выше явного вида коэффициентов α и β видно, что они становятся бесконечными только если det обращается в ноль. Так как знаменатель коэффициентов отражения R и прохождения D равен квадрату модуля det, то мы получаем утверждение, которое надо было проверить: уровни энергии в яме при отрицательных энергиях соответствуют нулям знаменателя коэффициентов прохождения и отражения.

Дополнение. Решение системы линейных уравнений для α и δ. Запишем эти уравнения в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} \left(1+\frac{k}{k_1}\right)e^{-ik_1 a} & -\left(1-\frac{k}{k_1}\right)e^{ik_1 a} \\ \left(1-\frac{k}{k_1}\right)e^{ik_1 a} & -\left(1-\frac{k}{k_1}\right)e^{-ik_1 a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\left(1-\frac{k}{k_1}\right)e^{-ik_1 a} \\ -\left(1+\frac{k}{k_1}\right)e^{ik_1 a} \end{pmatrix}.$$

Для решения системы теперь достаточно найти обратную матрицу и домножить на нее исходное матричное уравнение. Известно (и легко проверяется), что для матрицы размера 2×2, имеющей вид:

$$\begin{pmatrix} x & y \\ z & w \end{pmatrix}$$

обратной является матрица:

$$\frac{1}{\det}\begin{pmatrix} w & -y \\ -z & x \end{pmatrix}, \qquad \text{где} \quad \det = xw - yz.$$

Поэтому получаем для α и δ:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \delta \end{pmatrix} = \frac{1}{\det}\begin{pmatrix} -\left(1+\frac{k}{k_1}\right)e^{-ik_1a} & \left(1-\frac{k}{k_1}\right)e^{ik_1a} \\ -\left(1-\frac{k}{k_1}\right)e^{ik_1a} & \left(1+\frac{k}{k_1}\right)e^{-ik_1a} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\left(1-\frac{k}{k_1}\right)e^{-ik_1a} \\ -\left(1+\frac{k}{k_1}\right)e^{ik_1a} \end{pmatrix},$$

где det имеет в точности тот вид, который приведен выше в основном тексте.