Übung 1. *Tunneleffekt*

Ein Teilchen der Masse m und der Energie E läuft von $x = -\infty$ gegen das Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0\,, & (|x| \geq a/2) \\ V_0\,, & (|x| < a/2) \end{cases} \qquad (a > 0,\, V_0 > 0)\,.$$

Löse die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung $H\psi = E\psi$ mit dem Ansatz

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} && (x < -a/2)\,, && k = k(E) \\ \psi_{II}(x) &= A_2 e^{lx} + B_2 e^{-lx} && (|x| < a/2)\,, && l = l(E, V_0) \\ \psi_{III}(x) &= A_3 e^{ikx} && (x > a/2)\,. \end{aligned}$$

Verifiziere, dass die Transmissions- ($T = |A_3/A_1|^2$) und Reflexionskoeffizienten ($R = |B_1/A_1|^2$) im Fall $0 < E < V_0$ die Bedingung $R + T = 1$ erfüllen und dass

$$T(E) = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2\left(\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}\, a\right)}$$

gilt.

Hinweise: Bei $x = \pm a/2$ sind $\psi(x)$ und $d\psi/dx$ stetig.

Klassisch wäre $T(E) = 0$. Hier ist das aber nicht der Fall: Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Gebiet rechts vom Potential zu finden, ist nicht Null. Es kann also durch das Potential *tunneln*! Was passiert für $\hbar \to 0$?

Lösung: Die Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

lautet in den drei Bereichen

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi &= 0\,, \quad (I + III) \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi &= 0\,, \quad (II) \end{aligned}$$

wo sie separat durch den Ansatz

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}\,, \\ \psi_{II}(x) &= A_2 e^{lx} + B_2 e^{-lx}\,, \\ \psi_{III}(x) &= A_3 e^{ikx} \end{aligned}$$

mit $k^2 = 2mE/\hbar^2$, $l^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$ gelöst wird. Zudem zeigt eine Integration der Schrödinger-Gleichung über $[x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon]$, $\varepsilon \to 0$

$$\frac{d\psi}{dx}(x_0^+) - \frac{d\psi}{dx}(x_0^-) = \lim_{\varepsilon \to 0}\int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2}(x)dx = -\frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\varepsilon \to 0}\int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon}(E - V(x))\psi(x)dx = 0\,,$$

dass $d\psi/dx$ und damit auch ψ an jeder Stelle $x_0 \in \mathbb{R}$ stetig sind. Für die Stellen $x_0 = \pm a/2$ liefert dies

$$\begin{aligned} A_1 e^{-\frac{ika}{2}} + B_1 e^{\frac{ika}{2}} &= A_2 e^{-\frac{la}{2}} + B_2 e^{\frac{la}{2}}\,, \\ ikA_1 e^{-\frac{ika}{2}} - ikB_1 e^{\frac{ika}{2}} &= lA_2 e^{-\frac{la}{2}} - lB_2 e^{\frac{la}{2}}\,, \\ A_2 e^{\frac{la}{2}} + B_2 e^{-\frac{la}{2}} &= A_3 e^{\frac{ika}{2}}\,, \\ lA_2 e^{\frac{la}{2}} - lB_2 e^{-\frac{la}{2}} &= ikA_3 e^{\frac{ika}{2}}\,. \end{aligned}$$

Die beiden letzten Gleichungen liefern

$$A_2 = \frac{ik+l}{2l} e^{(ik-l)\frac{a}{2}} A_3 \ , \qquad B_2 = \frac{l-ik}{2l} e^{(ik+l)\frac{a}{2}} A_3 \ ,$$

und die beiden ersten dann

$$A_1 = [(ik+l)^2 e^{-la} - (l-ik)^2 e^{la}] \frac{e^{ika}}{4ikl} A_3 \ , \qquad B_1 = \frac{k^2+l^2}{4ikl} (e^{la} - e^{-la}) A_3 \ .$$

Damit wird

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{|16k^2l^2|}{D} \ , \qquad R = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 = \frac{|k^2+l^2|^2 |e^{la} - e^{-la}|^2}{D} \ ,$$

mit

$$D = |(ik+l)^2 e^{-la} - (l-ik)^2 e^{la}|^2 = (l^2-k^2)^2 (e^{la} - e^{-la})^2 + (2kl)^2 (e^{la} + e^{-la})^2 = 4[(k^2+l^2)^2 \sinh^2(la) + 4k^2l^2] \ ,$$

also

$$T = \frac{16k^2l^2}{D}$$
$$R = \frac{4(k^2+l^2)^2 \sinh^2(la)}{D},$$

und damit $T + R = 1$. Es genügt also, T weiter zu diskutieren:

$$T(E) = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2\left(\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} a\right)}$$

und insbesondere

$$\lim_{E \searrow 0} T(E) = 0 \ , \qquad \lim_{E \nearrow V_0} T(E) = \lim_{E \nearrow V_0} \frac{4E}{4E + \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0^2} = \frac{1}{1 + \frac{ma^2 V_0}{2\hbar^2}} \ .$$

Für $\hbar \to 0$ verschwindet der Tunneleffekt: $T(E) \to 0$ $(0 < E < V_0)$, wie man klassisch erwarten würde.

Übung 2. *Spektral- und Eigenwerte*

Physikalische Observablen werden in der Quantenmechanik als selbstadjungierte Operatoren auf einem komplexen Hilbertraum von Wellenfunktionen aufgefasst. Das Spektrum $\sigma(A)$ eines selbstadjungierten Operators $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}$ ist definiert durch

$$\begin{aligned} \lambda \in \sigma(A) \quad &\Longleftrightarrow \quad \text{zu jedem } \epsilon > 0 \text{ existiert ein Zustand } \psi_\epsilon \in \mathcal{H} \ (\|\psi_\epsilon\| = 1), \\ &\qquad\quad \text{so dass } \|(A - \lambda)\psi_\epsilon\| \leqslant \epsilon \\ &\Longleftrightarrow \quad \{\lambda \in \mathbb{C} \ : \ A - \lambda \mathbb{1} \text{ besitzt keine beschränkte Inverse}\} \end{aligned}$$

wobei $\|\cdot\|$ die zum Skalarprodukt von $\mathcal{H}$ gehörige Norm ist.

Eine Messung einer physikalischen Observablen (dargestellt durch den Operator) A hat die Werte $\lambda \in \sigma(A)$ als mögliche Messergebnisse. Ist der Hilbertraum endlich-dimensional, so besteht $\sigma(A)$ aus den Eigenwerten von A. Im unendlich-dimensionalen Fall gilt dies aber im allgemeinen nicht mehr, wie wir mithilfe eines expliziten Beispiels zeigen.

Wir betrachten im Folgenden den unendlich-dimensionalen Hilbertraum

$$l_2 := \left\{ x = \{x_i\}_{i=1}^\infty \subset \mathbb{C} \ : \ \|x\|^2 := \sum_{i=1}^\infty |x_i|^2 < \infty \right\}$$

der quadratsummierbaren Folgen mit dem Skalarprodukt

$$\langle x|y \rangle := \sum_{i=1}^\infty \bar{x}_i y_i \qquad \text{für } x = \{x_i\}_{i=1}^\infty, \ y = \{y_i\}_{i=1}^\infty \in l_2$$

und den Operator, der durch die einseitige Verschiebung definiert ist

$$S \,:\, l_2 \longrightarrow l_2 \,, \quad (x_1, x_2, x_3, \ldots) \mapsto (0, x_1, x_2, x_3, \ldots) \,.$$

(a) Zeige, dass S keinen Eigenwert besitzt.

Obwohl S keinen Eigenwert besitzt, ist sein Spektrum nicht leer. Tatsächlich besteht es aus der abgeschlossenen Einheitsscheibe in $\mathbb{C}$. Um dies zu zeigen, benötigen wir einige allgemeine Vorbereitungen. Für die Teilaufgaben (b) bis (d) sei A ein beschränkter Operator auf einem komplexen Hilbertraum $\mathcal{H}$ mit Skalarprodukt $\langle\cdot|\cdot\rangle$ und zugehöriger Norm $\|\cdot\|$.

(b) Zeige, dass Spektralwerte vom Betrag her nicht grösser als die Norm ihres Operators sein können:

$$\lambda \in \mathbb{C} \,:\quad |\lambda| > \|A\| \Rightarrow \lambda \notin \sigma(A) \quad \text{wobei} \quad \|A\| := \sup_{0 \neq x \in \mathcal{H}} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \,.$$

Hinweis: Benutze, dass für $|\lambda| > \|A\|$ der folgende Satz (von Neumann) gilt:

$$(\lambda \mathbb{1} - A)^{-1} = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{\lambda} \left(1 + \sum_{k=1}^{N} \left(\frac{A}{\lambda} \right)^k \right) \tag{1}$$

wobei die Konvergenz bezüglich der Operatornorm verstanden werden muss.

(c) Zeige, dass $\sigma(A)$ abgeschlossen ist. *Hinweis*: Zeige und benutze die Stetigkeit von $f(\lambda) := \lambda\mathbb{1} - A$ bzw. dass die Menge aller invertierbaren Operatoren offen ist.

(d) Nehme an, es existiere einen zu A adjungierten Operator $A^\dagger$, d.h. $\langle A^\dagger x|y\rangle = \langle x|Ay\rangle$ für alle $x, y \in \mathcal{H}$. Zeige, dass dann das Spektrum von $A^\dagger$ aus den komplex konjugierten Spektralwerten von A besteht:

$$\sigma(A^\dagger) = \{\bar{\lambda} \in \mathbb{C} \,:\, \lambda \in \sigma(A)\} \,.$$

Nun kehren wir zu unserem Beispiel zurück und zeigen:

(e) $S^\dagger \,:\, l_2 \longrightarrow l_2$, $(x_1, x_2, x_3, \ldots) \mapsto (x_2, x_3, \ldots)$ ist die zu S adjungierte Abbildung. Ferner haben wir, dass

$$|\lambda| < 1 \Rightarrow \lambda \text{ ist ein Eigenwert von } S^\dagger.$$

Hinweis: Konstruiere einen expliziten Eigenvektor zu einem Eigenwert λ.

(f) Mit Hilfe der Resultate (b) bis (e) folgt, dass

$$\sigma(S) = \{\lambda \in \mathbb{C} \,:\, |\lambda| \leqslant 1\}.$$

Lösung:

(a) Wir nehmen an, $x = \{x_i\}_{i=1}^\infty$ sei ein Eigenvektor von S zum Eigenwert λ. Dann gilt

$$S(x) = (0, x_1, x_2, x_3, \ldots) = (\lambda x_1, \lambda x_2, \lambda x_3, \ldots).$$

Für $\lambda = 0$ folgt sofort, dass $x_i = 0$, für alle $i = 1, 2, 3, \ldots$, was ein Widerspruch zu der Annahme ist, dass x ein Eigenvektor ist. Ist $\lambda \neq 0$, so zeigt der Vergleich des ersten Folgeglieds, dass $x_1 = 0$ ist. Sukzessiv folgt dann $x_{i+1} = \lambda^{-1} x_i$, so dass wieder $x_i = 0$, für alle $i = 1, 2, 3, \ldots$ gelten muss.

(b) Für $|\lambda| > \|A\|$ hat $\lambda\mathbb{1} - A$ nach Satz (1) eine Inverse. Ferner ist sie beschränkt, denn nach Voraussetzung

$$\|(\lambda\mathbb{1} - A)^{-1}\| \leqslant \frac{1}{|\lambda|}(1 + \sum_{k=1}^{\infty}\left(\frac{\|A\|}{|\lambda|}\right)^k) = \frac{1}{|\lambda| - \|A\|} < \infty .$$

Damit ist $\lambda \notin \sigma(A)$.

(c) Die Funktion $f(\lambda) := \lambda\mathbb{1} - A$ ist wegen

$$\|f(\lambda) - f(\mu)\| = \|\lambda\mathbb{1} - A - \mu\mathbb{1} + A\| = |\lambda - \mu|\|\mathbb{1}\| = |\lambda - \mu|$$

stetig. Mit Satz (1) ist auch schnell ersichtlich, dass die Menge aller invertierbaren beschränkten Operatoren mit beschränkter Inverse offen ist. Wir betrachten einen beschränkten invertierbaren Operator T mit beschränkter Inverse und wollen zeigen, dass dann ein $\eta > 0$ existiert, so dass alle beschränkten Operatoren S mit $\|T - S\| < \eta$ ebenfalls invertierbar mit beschränkter Inverse sind. Wählen wir zum Beispiel $\eta = \|T^{-1}\|^{-1}$, so folgt

$$\|\mathbb{1} - T^{-1}S\| = \|T^{-1}(T - S)\| \leqslant \|T^{-1}\|\|T - S\| < \|T^{-1}\|\eta = 1 .$$

Nach Satz (1) und Teilaufgabe (b) ist folglich $\mathbb{1} - (\mathbb{1} - T^{-1}S) = T^{-1}S$ invertierbar mit beschränkter Inverse und beschränkt, und somit auch $TT^{-1}S = S$. Mit Hilfe dieser zwei Aussagen, zeigen wir jetzt, dass $\sigma(A)^c := \mathbb{C} \setminus \sigma(A)$ offen ist.

Nach Definition ist $\sigma(A)^c = \{\lambda \in \mathbb{C} \ : \ f(\lambda)$ ist invertierbar mit beschränkter Inverse$\}$. Da die Menge der invertierbaren beschränkten Operatoren mit beschränkter Inverse offen ist, existiert für jedes gegebene $\lambda \in \sigma(A)^c$ ein offener Ball $B_\epsilon(f(\lambda))$ vom Radius $\epsilon > 0$ um $f(\lambda)$ - im Raum $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ der beschränkten Operatoren auf $\mathcal{H}$ - in dem alle beschränkten Operatoren invertierbar mit beschränkter Inverse sind. Da f stetig ist, ist sie auch folgenstetig. So gilt für alle konvergenten Folgen $\{\lambda_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathbb{C}$ mit Grenzwert λ, dass die Operatoren $f(\lambda_n)$ ab einem genügend grossen Index n_0 für alle $n > n_0$ in $B_\epsilon(f(\lambda))$ und darum invertierbar mit beschränkter Inverse sind. Damit hat λ eine offene Umgebung in $\mathbb{C}$, in der f invertierbar mit beschränkter Inverse ist. Somit ist $\sigma(A)^c$ offen.

(d) Aus der Definition der adjungierten Abbildung sehen wir, dass, wie gewohnt, für zwei beschränkte Operatoren A und B $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ gilt. Folglich ist auch der adjungierte Operator $A^\dagger$ eines beschränkten invertierbaren Operators A invertierbar mit beschränkter Inverse. Also ist mit $A - \lambda\mathbb{1}$ auch $A^\dagger - \bar{\lambda}\mathbb{1}$ invertierbar mit beschränkter Inverse. Es folgt $\lambda \notin \sigma(A) \Rightarrow \bar{\lambda} \notin \sigma(A^\dagger)$ oder die Kontraposition $\bar{\lambda} \in \sigma(A^\dagger) \Rightarrow \lambda \in \sigma(A)$, und die Behauptung folgt, wenn wir die Argumentation umkehren.

(e) Seien $x = \{x_i\}_{i=1}^{\infty}$, $y = \{y_i\}_{i=1}^{\infty} \in l_2$. Dann gilt:

$$\langle x|Sy\rangle = \langle (x_1, x_2, x_3, \ldots)|(0, y_1, y_2, \ldots)\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \bar{x}_{i+1}y_i = \langle (x_2, x_3, \ldots)|(y_1, y_2, \ldots)\rangle = \langle S^\dagger x|y\rangle .$$

Wir nehmen nun an, x sei ein Eigenvektor von $S^\dagger$ zum Eigenwert λ, dann gilt

$$S^\dagger(x) = (x_2, x_3, \ldots) = (\lambda x_1, \lambda x_2, \lambda x_3, \ldots) .$$

Ein sukzessiver Vergleich der Folgenglieder zeigt, dass $x_2 = \lambda x_1$, $x_3 = \lambda x_2 = \lambda^2 x_1$ und allgemeiner $x_i = \lambda^{i-1}x_1$. Die Bedingung $x \in l_2$ lautet dann

$$\sum_{i=1}^{\infty} |x_i|^2 = |x_1|^2 \sum_{i=1}^{\infty} |\lambda^{i-1}|^2 = |x_1|^2 \sum_{i=0}^{\infty} |\lambda^2|^i < \infty ,$$

was genau dann gilt, wenn $|\lambda| < 1$ und somit ist die Behauptung gezeigt.

(f) Aus (d) und (e) folgt, dass $\{\lambda \in \mathbb{C} \ : \ |\lambda| < 1\} \subset \sigma(S^\dagger) \Rightarrow \{\lambda \in \mathbb{C} \ : \ |\lambda| < 1\} \subset \sigma(S)$. Aus (b) folgt dann, mit $\|S\| = 1$, dass Werte $\lambda \in \mathbb{C}$ mit $|\lambda| > 1$ nicht im Spektrum von S liegen könnnen. Da das Spektrum nach (c) abgeschlossen ist, folgt $\sigma(S) = \{\lambda \in \mathbb{C} \ : \ |\lambda| \leqslant 1\}$.