Inhaltsübersicht zu Band 1 und 2

Band 1

1 Welle und Teilchen

2 Der mathematische Rahmen

3 Die Postulate der Quantenmechanik

4 Einfache Systeme

5 Der harmonische Oszillator

6 Der Drehimpuls in der Quantenmechanik

Band 2

7 Teilchen in einem Zentralpotential. Das Wasserstoffatom

8 Elementare Streutheorie

9 Der Spin des Elektrons

10 Addition von Drehimpulsen

11 Stationäre Störungstheorie

12 Fein- und Hyperfeinstruktur des Wasserstoffatoms

13 Näherungsmethoden für zeitabhängige Probleme

14 Systeme identischer Teilchen

Anhang I, II, III

Inhaltsverzeichnis

1 Welle und Teilchen 1

1.1 Elektromagnetische Wellen und Photonen 2

1.1.1 Lichtquanten und Einstein-de-Broglie-Beziehungen 2

1.1.2 Der Welle-Teilchen-Dualismus 3

1.1.3 Die Spektralzerlegung 8

1.2 Materielle Teilchen und Materiewellen 10

1.2.1 Die Einstein-de-Broglie-Beziehungen 10

1.2.2 Wellenfunktion und Schrödinger-Gleichung 11

1.3 Freie Teilchen. Wellenpakete 13

1.3.1 Freies Teilchen 13

1.3.2 Form des Wellenpakets 15

1.3.3 Die Heisenbergsche Unschärferelation 18

1.3.4 Zeitliche Entwicklung eines freien Wellenpakets 20

1.4 Teilchen in einem zeitunabhängigen Potential 23

1.4.1 Separation der Variablen. Stationäre Zustände 24

1.4.2 Eindimensionale Rechteckpotentiale – qualitative Behandlung . . 26

Ergänzungen zu Kapitel 1 33

1.5 De-Broglie-Wellenlängen 33

1.6 Zur Unschärferelation 36

1.6.1 Makroskopisches System 36

1.6.2 Mikroskopisches System 36

1.7 Unschärferelationen und Atomparameter 37

1.8 Ein Experiment zur Unschärferelation 39

1.9 Ein zweidimensionales Wellenpaket 42

1.9.1 Einführung 42

1.9.2 Winkeldispersion und laterale Ausdehnung 42

1.9.3 Physikalische Diskussion 44

1.10 Zusammenhang zwischen ein- und dreidimensionalen Problemen 45

1.10.1 Dreidimensionales Wellenpaket 45

1.10.2 Rechtfertigung des eindimensionalen Modells 48

1.11 Eindimensionales Gaußsches Wellenpaket 49

1.11.1 Definition eines Gaußschen Wellenpakets 49

1.11.2 Orts- und Impulsbreite. Unschärfebeziehung 50

1.11.3 Entwicklung des Wellenpakets 51

1.12 Stationäre Zustände eines Teilchens in einem eindimensionalen Rechteckpotential . . . 54
1.12.1 Allgemeine Eigenschaften . . . 55
1.12.2 Einfache Beispiele . . . 56
1.13 Wellenpaket an einer Potentialstufe . . . 66
1.13.1 Totalreflexion: $E < V_0$ . . . 66
1.13.2 Partielle Reflexion: $E > V_0$ . . . 69
1.14 Aufgaben zu Kapitel 1 . . . 72

2 Der mathematische Rahmen **77**
2.1 Der Raum der Wellenfunktionen eines Teilchens . . . 77
2.1.1 Struktur des Raumes der Wellenfunktionen . . . 78
2.1.2 Orthonormierte Basen . . . 80
2.1.3 Kontinuierliche Basen . . . 83
2.2 Zustandsraum und Dirac-Schreibweise . . . 89
2.2.1 Einführung . . . 89
2.2.2 Ket- und Bravektoren . . . 91
2.2.3 Lineare Operatoren . . . 96
2.2.4 Hermitesche Konjugation . . . 99
2.3 Darstellungen im Zustandsraum . . . 103
2.3.1 Definition einer Darstellung . . . 103
2.3.2 Eigenschaften einer orthonormierten Basis . . . 104
2.3.3 Darstellung der Ket- und Bravektoren . . . 106
2.3.4 Darstellung von Operatoren . . . 108
2.3.5 Darstellungswechsel . . . 112
2.4 Eigenwertgleichungen. Observable . . . 114
2.4.1 Eigenwerte und Eigenvektoren eines Operators . . . 114
2.4.2 Observable . . . 118
2.4.3 Kommutierende Observable . . . 121
2.5 Zwei wichtige Beispiele . . . 127
2.5.1 Die Orts- und die Impulsdarstellung . . . 127
2.5.2 Orts- und Impulsoperator . . . 131
2.6 Tensorprodukte von Zustandsräumen . . . 135
2.6.1 Einführung . . . 135
2.6.2 Definition und Eigenschaften des Tensorprodukts . . . 136
2.6.3 Eigenwertgleichung im Produktraum . . . 139
2.6.4 Anwendungen . . . 142

Ergänzungen zu Kapitel 2 **147**
2.7 Schwarzsche Ungleichung . . . 147
2.8 Eigenschaften linearer Operatoren . . . 148
2.8.1 Spur eines Operators . . . 148
2.8.2 Kommutatoralgebra . . . 149
2.8.3 Einschränkung eines Operators . . . 150
2.8.4 Operatorfunktionen . . . 151

2.8.5 Ableitung eines Operators . . . 154
2.9 Unitäre Operatoren . . . 157
2.9.1 Allgemeine Eigenschaften . . . 157
2.9.2 Unitäre Transformation von Operatoren . . . 161
2.9.3 Infinitesimale unitäre Operatoren . . . 162
2.10 Orts- und Impulsdarstellung . . . 163
2.10.1 Ortsdarstellung . . . 163
2.10.2 Impulsdarstellung . . . 165
2.11 Eigenschaften zweier Observabler mit dem Kommutator $i\hbar$ . . . 167
2.11.1 Der Operator $S(\lambda)$ . . . 167
2.11.2 Eigenwerte und Eigenvektoren des Operators Q . . . 168
2.11.3 $\{|q\rangle\}$-Darstellung . . . 169
2.11.4 $\{|p\rangle\}$-Darstellung . . . 170
2.12 Der Paritätsoperator . . . 171
2.12.1 Definition und Eigenschaften . . . 171
2.12.2 Gerade und ungerade Operatoren . . . 174
2.12.3 Eigenzustände einer geraden Observablen . . . 176
2.12.4 Anwendung auf einen besonders wichtigen Fall . . . 176
2.13 Zweidimensionaler unendlich tiefer Potentialtopf . . . 177
2.13.1 Definition und Eigenzustände . . . 177
2.13.2 Energieniveaus . . . 178
2.14 Aufgaben zu Kapitel 2 . . . 180

3 Die Postulate der Quantenmechanik **187**
3.1 Einleitung . . . 187
3.2 Die Postulate . . . 188
3.2.1 Der Zustand eines Systems . . . 188
3.2.2 Physikalische Größen . . . 189
3.2.3 Messung physikalischer Größen . . . 189
3.2.4 Zeitliche Entwicklung des Systems . . . 195
3.2.5 Korrespondenzregeln . . . 196
3.3 Physikalische Deutung der Postulate. Observable und ihre Messung . . . 198
3.3.1 Korrespondenzregeln und Wellenfunktion . . . 198
3.3.2 Quantisierung physikalischer Größen . . . 199
3.3.3 Der Messprozess . . . 200
3.3.4 Erwartungswert einer Observablen . . . 200
3.3.5 Standardabweichung . . . 203
3.3.6 Kompatible Observable . . . 205
3.4 Bedeutung der Schrödinger-Gleichung . . . 210
3.4.1 Allgemeine Eigenschaften . . . 210
3.4.2 Konservative Systeme . . . 218
3.5 Superpositionsprinzip und Vorhersagen . . . 226
3.5.1 Wahrscheinlichkeitsamplitude und Interferenzeffekte . . . 226
3.5.2 Zusammenhang zwischen Zuständen und Messergebnis . . . 232

Ergänzungen zu Kapitel 3 241
3.6 Teilchen in einem unendlich tiefen Potentialtopf 242
3.6.1 Verteilung der Impulswerte in einem stationären Zustand 242
3.6.2 Entwicklung der Wellenfunktion 246
3.6.3 Störung durch eine Ortsmessung 250
3.7 Wahrscheinlichkeitsstrom. Spezialfälle 251
3.7.1 Wahrscheinlichkeitsstrom in Bereichen konstanten Potentials . . . 252
3.7.2 Anwendung auf Potentialstufen 252
3.7.3 Reflexion an einer zweidimensionalen Potentialstufe 254
3.8 Standardabweichung konjugierter Observabler 257
3.8.1 Unschärferelation für P und Q 257
3.8.2 „Minimales" Wellenpaket 258
3.9 Messung an einem Teilsystem 260
3.9.1 Berechnung physikalischer Vorhersagen 260
3.9.2 Physikalische Bedeutung des Tensorprodukts 262
3.9.3 Allgemeiner Zustand 263
3.10 Der Dichteoperator 264
3.10.1 Problemstellung 264
3.10.2 Statistisches Zustandsgemisch 265
3.10.3 Reiner Fall. Einführung des Dichteoperators 266
3.10.4 Statistisches Gemisch. Gemischter Fall 269
3.10.5 Beispiele für den Dichteoperator 273
3.11 Der Entwicklungsoperator 277
3.11.1 Allgemeine Eigenschaften 277
3.11.2 Konservative Systeme 279
3.12 Schrödinger- und Heisenberg-Bild 280
3.13 Eichinvarianz 282
3.13.1 Problemstellung. Begriff der Eichung 282
3.13.2 Eichinvarianz in der klassischen Mechanik 283
3.13.3 Eichinvarianz in der Quantenmechanik 288
3.14 Der Propagator der Schrödinger-Gleichung 295
3.14.1 Der physikalische Grundgedanke 295
3.14.2 Existenz und Eigenschaften des Propagators 297
3.14.3 Pfadintegral-Formulierung der Quantenmechanik 300
3.15 Instabile Niveaus. Lebensdauer 303
3.15.1 Einführung 303
3.15.2 Definition der Lebensdauer 304
3.15.3 Phänomenologische Beschreibung 305
3.16 Aufgaben zu Kapitel 3 306
3.17 Gebundene Zustände in einem Potentialtopf 315
3.17.1 Quantisierung der gebundenen Energiezustände 317
3.17.2 Energie des Grundzustandes 319
3.18 Nichtgebundene Zustände 322
3.18.1 Transmissionsmatrix $M(k)$ 323
3.18.2 Transmissions- und Reflexionskoeffizienten 326

3.18.3 Beispiel . . . 327
3.19 Eindimensionales periodisches Potential . . . 329
3.19.1 Durchgang durch mehrere identische Potentialbarrieren . . . 330
3.19.2 Erlaubte und verbotene Energiebänder . . . 335
3.19.3 Energiequantisierung bei einem periodischen Potential. Einfluss der Ränder . . . 337

4 Einfache Systeme **347**
4.1 Spin-1/2-Teilchen. Quantisierung des Drehimpulses . . . 348
4.1.1 Experimenteller Nachweis . . . 348
4.1.2 Theoretische Beschreibung . . . 353
4.2 Die Postulate am Beispiel des Spins 1/2 . . . 355
4.2.1 Präparation der verschiedenen Spinzustände . . . 355
4.2.2 Messung des Spins . . . 358
4.2.3 Spin 1/2 und homogenes Magnetfeld . . . 363
4.3 Systeme mit zwei Niveaus . . . 365
4.3.1 Problemstellung . . . 366
4.3.2 Statischer Aspekt . . . 367
4.3.3 Dynamischer Aspekt . . . 372

Ergänzungen zu Kapitel 4 **377**
4.4 Die Pauli-Matrizen . . . 377
4.4.1 Definition, Eigenwerte und Eigenvektoren . . . 377
4.4.2 Einfache Eigenschaften . . . 378
4.4.3 Eine zweckmäßige Basis . . . 379
4.5 Diagonalisierung einer hermiteschen 2×2-Matrix . . . 380
4.5.1 Einführung . . . 380
4.5.2 Wechsel des Bezugspunktes . . . 380
4.5.3 Eigenwerte und Eigenvektoren . . . 382
4.6 System mit zwei Niveaus. Fiktiver Spin . . . 384
4.6.1 Einführung . . . 384
4.6.2 Interpretation des Hamilton-Operators . . . 384
4.6.3 Interpretation der Effekte . . . 386
4.7 Systeme mit zwei Spins 1/2 . . . 388
4.7.1 Quantenmechanische Beschreibung . . . 389
4.7.2 Vorhersage von Messergebnissen . . . 392
4.8 Dichtematrix für einen Spin 1/2 . . . 395
4.8.1 Einführung . . . 395
4.8.2 Dichtematrix bei vollständiger Polarisation des Spins . . . 395
4.8.3 Beispiel für ein statistisches Gemisch: Unpolarisierter Spin . . . 396
4.8.4 Thermodynamisches Gleichgewicht in einem statischen Feld . . . 398
4.8.5 Zerlegung nach Pauli-Matrizen . . . 398
4.9 Magnetische Resonanz . . . 399
4.9.1 Klassische Behandlung: Rotierendes Bezugssystem . . . 400

4.9.2 Quantenmechanische Behandlung . . . 402
4.9.3 Bloch-Gleichungen . . . 408
4.10 Modell des Ammoniakmoleküls . . . 411
4.10.1 Beschreibung des Modells . . . 411
4.10.2 Eigenfunktionen und Eigenwerte des Hamilton-Operators . . . 413
4.10.3 Das Ammoniakmolekül als Zwei-Niveau-System . . . 421
4.11 Kopplung zwischen stabilem und instabilem Zustand . . . 426
4.11.1 Einführung und Bezeichnungen . . . 426
4.11.2 Schwache Kopplung . . . 427
4.11.3 Kopplung von Niveaus mit gleicher Energie . . . 428
4.12 Aufgaben zu Kapitel 4 . . . 431

5 Der harmonische Oszillator **437**
5.1 Einführung . . . 437
5.1.1 Bedeutung des harmonischen Oszillators . . . 437
5.1.2 Klassischer harmonischer Oszillator . . . 439
5.1.3 Allgemeine Eigenschaften des Hamilton-Operators . . . 441
5.2 Eigenwerte des Hamilton-Operators . . . 442
5.2.1 Bezeichnungen . . . 442
5.2.2 Das Spektrum . . . 445
5.2.3 Entartung der Eigenwerte . . . 448
5.3 Eigenzustände des Hamilton-Operators . . . 449
5.3.1 $\{|\varphi_n\rangle\}$-Darstellung . . . 450
5.3.2 Wellenfunktionen zu den stationären Zuständen . . . 453
5.4 Physikalische Diskussion . . . 456
5.4.1 Erwartungswert und Standardabweichung von X und P . . . 456
5.4.2 Eigenschaften des Grundzustands . . . 459
5.4.3 Entwicklung der Erwartungswerte . . . 460

Ergänzungen zu Kapitel 5 **463**
5.5 Beispiele für harmonische Oszillatoren . . . 464
5.5.1 Kernschwingungen in einem zweiatomigen Molekül . . . 464
5.5.2 Schwingungen von Kernen in einem Kristall . . . 471
5.5.3 Torsionsschwingungen eines Moleküls: Beispiel Ethylen . . . 473
5.5.4 Schwere Myonenatome . . . 476
5.6 Stationäre Zustände. Hermitesche Polynome . . . 481
5.6.1 Hermitesche Polynome . . . 481
5.6.2 Eigenfunktionen des Hamilton-Operators für den harmonischen Oszillator . . . 484
5.7 Lösung der Eigenwertgleichung mit der Polynommethode . . . 487
5.7.1 Wechsel der Variablen . . . 487
5.7.2 Polynommethode . . . 489
5.8 Stationäre Zustände in der Impulsdarstellung . . . 493
5.8.1 Wellenfunktion im Impulsraum . . . 494
5.8.2 Physikalische Diskussion . . . 496

5.9 Dreidimensionaler isotroper harmonischer Oszillator . . . 498
5.9.1 Hamilton-Operator . . . 498
5.9.2 Separation der Variablen . . . 499
5.9.3 Entartung der Energieniveaus . . . 501
5.10 Geladener harmonischer Oszillator im konstanten elektrischen Feld . . . 502
5.10.1 Eigenwertgleichung von $H'(\mathcal{E})$ in der Ortsdarstellung . . . 503
5.10.2 Physikalische Diskussion . . . 505
5.10.3 Anwendung des Translationsoperators . . . 507
5.11 Quasiklassische Zustände des Oszillators . . . 509
5.11.1 Quasiklassische Zustände . . . 510
5.11.2 Eigenschaften der Zustände $|\alpha\rangle$ . . . 514
5.11.3 Zeitliche Entwicklung eines quasiklassischen Zustands . . . 521
5.11.4 Beispiel eines makroskopischen Oszillators . . . 523
5.12 Eigenschwingungen gekoppelter Oszillatoren . . . 524
5.12.1 Gekoppelte Schwingungen in der klassischen Mechanik . . . 526
5.12.2 Schwingungszustände des Systems in der Quantenmechanik . . . 530
5.13 Lineare Oszillatorenkette. Phononen . . . 534
5.13.1 Klassische Behandlung . . . 535
5.13.2 Quantenmechanische Behandlung . . . 544
5.13.3 Anwendung auf Kristallschwingungen . . . 548
5.14 Kontinuierliches System. Photonen . . . 551
5.14.1 Problemstellung . . . 551
5.14.2 Eigenschwingungen eines mechanischen Systems (Saite) . . . 552
5.14.3 Photonen . . . 559
5.15 Oszillator im thermodynamischen Gleichgewicht . . . 566
5.15.1 Energieerwartungswert . . . 566
5.15.2 Physikalische Diskussion . . . 568
5.15.3 Anwendungen . . . 570
5.15.4 Wahrscheinlichkeitsverteilung der Observablen X . . . 574
5.16 Aufgaben zu Kapitel 5 . . . 580

6 Der Drehimpuls in der Quantenmechanik **585**
6.1 Die Bedeutung des Drehimpulses . . . 585
6.2 Drehimpulsvertauschungsrelationen . . . 586
6.2.1 Bahndrehimpuls . . . 586
6.2.2 Verallgemeinerung: Definition eines Drehimpulses . . . 588
6.2.3 Problemstellung . . . 589
6.3 Allgemeine Theorie des Drehimpulses . . . 589
6.3.1 Definitionen und Notationen . . . 589
6.3.2 Die Eigenwerte von $\boldsymbol{J}^2$ und J_z . . . 591
6.3.3 Standarddarstellungen $\{|k, j, m\rangle\}$ . . . 595
6.4 Anwendung auf Bahndrehimpulse . . . 603
6.4.1 Eigenwerte und Eigenfunktionen von $\boldsymbol{L}^2$ und L_z . . . 603
6.4.2 Physikalische Diskussion . . . 611

Ergänzungen zu Kapitel 6 **621**
6.5 Die Kugelflächenfunktionen 621
6.5.1 Berechnung der Kugelflächenfunktionen 621
6.5.2 Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen 626
6.6 Drehimpuls und Drehungen 633
6.6.1 Einleitung 633
6.6.2 Eigenschaften der räumlichen Drehungen $\mathcal{R}$ 634
6.6.3 Drehoperatoren im Zustandsraum. Teilchen ohne Spin 636
6.6.4 Drehoperatoren für ein beliebiges System 643
6.6.5 Drehung von Observablen 646
6.6.6 Drehinvarianz 649
6.7 Drehung zweiatomiger Moleküle 654
6.7.1 Einleitung 654
6.7.2 Klassische Behandlung des starren Rotators 654
6.7.3 Quantisierung des starren Rotators 656
6.7.4 Nachweise für die Rotation von Molekülen 661
6.8 Drehimpuls eines zweidimensionalen Oszillators 668
6.8.1 Einleitung 668
6.8.2 Klassifikation der stationären Zustände 672
6.8.3 Andere Klassifikation der stationären Zustände 674
6.8.4 Quasiklassische Zustände 679
6.9 Geladenes Teilchen im Magnetfeld. Landau-Niveaus 682
6.9.1 Wiederholung der klassischen Ergebnisse 683
6.9.2 Allgemeine Eigenschaften 687
6.9.3 Homogenes Magnetfeld 690
6.10 Aufgaben zu Kapitel 6 705

Einige Fundamentalkonstanten der Physik **713**

Koordinatensysteme **714**

Einige nützliche Formeln **716**

Sach- und Namenverzeichnis **717**