

Max Schubert/Gerhard Weber

Quantentheorie

Grundlagen und Anwendungen

Mit 68 Abbildungen

Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg · Berlin · Oxford

Inhalt

Verzeichnis der nach Hauptrichtungen der Physik geordneten Anwendungen	15
Mathematische Zeichen und Symbole für physikalische Größen	17
A Zusammenstellung von Gesetzmäßigkeiten der klassischen Physik ..	21
1 Theoretische Grundlagen der klassischen Physik	23
1.1 Mechanik	23
1.1.1 Kanonische Mechanik	23
1.1.2 Einige repräsentative Beispiele der Mechanik	28
1.1.2.1 Eindimensionaler harmonischer Oszillator	28
1.1.2.2 Kepler-Problem	29
1.1.2.3 Relativistische Bewegung eines Teilchens	30
1.2 Elektrodynamik	30
1.3 Allgemein-feldtheoretische Grundbegriffe und Probleme	36
1.3.1 Kanonischer Feldformalismus	36
1.3.2 Aufbau von Feldtheorien und Folgerungen aus Invarianzen	38
1.3.3 Wellenstreuung an einer Raumgitterstruktur	49
1.3.4 Wellengruppen	51
1.3.5 Unschärferelation zwischen Ortskoordinate und Wellenzahl	52
1.4 Phänomenologische und statistische Thermodynamik	54
1.4.1 Phänomenologische Thermodynamik	54
1.4.2 Statistische Thermodynamik	57
2 Grundsätzliche Aspekte der klassisch-physikalischen Theorien	63
B Induktiver Zugang zur Quantentheorie	65
3 Empirische Befunde. Vorstufe zur Quantentheorie	67
3.1 Grundlegendes zur Atomistik	67
3.1.1 Atom als Ganzes	67
3.1.1.1 Atommassen	67
3.1.1.2 Atom- bzw. Molekülanzahl	68
3.1.1.3 Atom- bzw. Molekülvolumen	71
3.1.2 Diskrete Struktur der elektrischen Ladung	72
3.1.2.1 Nachweis der diskreten Struktur der Ladung	72
3.1.2.2 Elektronen als spezielle elementare Ladungsträger	75
3.1.2.3 Einige Bemerkungen zu anderen elementaren Ladungsträgern	78
3.1.3 Klassische Vorstellungen über die Struktur der Atome	79
3.1.3.1 Streuung schneller Elektronen	79
3.1.3.2 Streuung von α -Teilchen	80
3.1.3.3 Rutherford'sches Atommodell	83
3.1.4 Kontinuierliche und diskrete Struktur der elektromagnetischen Strahlung	85

3.1.4.1	Elektromagnetische Wellen	85
3.1.4.2	Diskrete Struktur der elektromagnetischen Strahlung	89
3.2	Theorie der Wärmestrahlung und die Entdeckung des universellen Wirkungsquantums	96
3.2.1	Wärmestrahlungsgesetze von Stefan, Boltzmann und Wien	96
3.2.2	Plancksches Strahlungsgesetz	97
3.3	Verfeinerte Vorstellungen über die Struktur der Atome	106
3.3.1	Serienspektren der Atome	107
3.3.2	Bohrsches Atommodell	109
3.3.3	Direkter Nachweis der diskreten Energieniveaus von Atomen (Franck-Hertz-Versuch)	110
3.4	Quantentheorie auf der Basis des Korrespondenzprinzips	111
3.4.1	Grundlagen des Korrespondenzprinzips	112
3.4.2	Beispiele zur Handhabung des Korrespondenzprinzips	116
3.4.2.1	Eindimensionaler harmonischer Oszillator	116
3.4.2.2	Starrer Rotator	118
3.4.2.3	Elektron im Coulomb-Potential	118
3.4.3	Unzulänglichkeiten der korrespondenzmäßigen (älteren) Quantentheorie ..	120
3.5	Wellenaspekt der stofflichen Materie	121
3.5.1	Nachweis der Materiewellen durch Beugungsexperimente	121
3.5.2	Klassische Wellentheorie der stofflichen Materie	125
4	Heisenbergsche Matrizenmechanik	130
4.1	Einführung in die Matrizenmechanik	130
4.2	Matrizenmechanische Dynamik	134
4.3	Matrizenmechanische Berechnung der Energieniveaus des harmonischen Oszillators	137
5	Schrödingersche Wellenmechanik	139
5.1	Schrödinger-Gleichung und statistische Interpretation der Wellenfunktion	140
5.2	Wellenmechanik im Operator-Formalismus	143
5.2.1	Eigenwertproblem	145
5.2.2	Mittelwerte hermitescher Operatoren	146
5.2.3	Nichtvertauschbarkeit wellenmechanischer Operatoren	146
5.2.4	Unschärferelation für Ort und Impuls	147
5.3	Stationäre Zustände und Energie-Eigenwertproblem	148
5.3.1	Übersicht über das Energie-Eigenwertproblem	149
5.4	Lösung des Energie-Eigenwertproblems ausgewählter physikalischer Systeme	156
5.4.1	Eindimensionales Kastenpotential	156
5.4.2	Eindimensionaler rechteckiger Potentialwall und Potentialtopf	158
5.4.3	Kräftefreie Rotation um eine feste Achse (starrer eindimensionaler Rotator)	164
5.4.4	Eindimensionaler harmonischer Oszillator	165
5.4.5	Kugelsymmetrisches Ein-Teilchen-Problem und Wasserstoff-Atom	169
5.4.5.1	Kugelsymmetrisches Potential	169
5.4.5.2	Coulomb-Potential	175
6	Zusammenhang zwischen Matrizen- und Wellenmechanik und Näherungsbeziehungen zur klassischen Mechanik	185
6.1	Zusammenhang zwischen Wellen- und Matrizenmechanik	185
6.1.1	Energie-Darstellung von Orts-, Impuls- und Energie-Matrix beim harmonischen Oszillator	187
6.2	Wentzel-Brillouin-Kramers-Näherung und Phasenintegralmethode	188

C	Deduktiver Aufbau der Quantentheorie. Dirac-Formulierung	193
7	Grundlegende Begriffe	195
7.1	Zustand	195
7.2	Dynamische Variable	197
7.3	Observable	199
8	Vertauschungsrelationen	202
8.1	Vertauschungsrelationen der Grundobservablen des Ortes und des Impulses	202
8.2	Vertauschungsrelationen von abgeleiteten Variablen	203
8.3	Observable ohne klassisches Analogon	204
8.4	Folgerungen für die Grundobservablen des Ortes und des Impulses	205
8.4.1	Eigenwertproblem der Grundobservablen	205
8.4.2	Darstellungen mit Hilfe von Eigenlösungen	207
9	Quantentheoretische Beschreibung des Meßprozesses	211
9.1	Messung einer Observablen am Einzelsystem	211
9.1.1	Diskretes Spektrum	211
9.1.2	Kontinuierliches Spektrum	212
9.1.3	Allgemeines Spektralverhalten	214
9.2	Messung einer Observablen an einer Gesamtheit von Einzelsystemen	216
9.3	Messung verschiedener Observabler	218
9.3.1	Verträgliche Observable	219
9.3.2	Nichtverträgliche Observable	221
9.4	Zusammenfassung	224
10	Vektorraum \mathcal{H} eines gegebenen physikalischen Systems	227
10.1	N punktförmige Teilchen ohne innere Freiheitsgrade	227
10.2	Allgemeines physikalisches System	229
10.3	Unabhängige Teilräume	230
11	Zeitliches Verhalten	232
11.1	Bewegungsgleichung des Zustandsvektors	232
11.2	Bestimmung der physikalisch-relevanten Größen	236
11.2.1	Schrödinger-Bild	236
11.2.2	Heisenberg-Bild	237
11.3	Allgemeines zu den Bildern der Quantentheorie	239
D	Quantentheoretische Behandlung konkreter physikalischer Systeme	243
12	Der harmonische Oszillator und seine Anwendungsmöglichkeiten	245
12.1	Behandlung des Nummernoperator-Eigenwertproblems auf der Basis von Operatorbeziehungen	246
12.2	Interpretationen. Besetzungszahldarstellung	249
13	Äußerer und innerer Drehimpuls eines Teilchens	252
13.1	Behandlung des Drehimpuls-Eigenwertproblems auf der Basis von Operatorbeziehungen	252
13.2	Bahndrehimpuls	256
13.3	Innerer Drehimpuls	258

14	Ein-Elektronen-Systeme	262
14.1	Elektron im vorgegebenen Potential	262
14.1.1	Zentralkraftfeld	263
14.1.2	Zwei-Zentren-Problem	266
14.1.3	Kastenpotential	270
14.1.4	Periodisches Potential	271
14.2	Gesamtdrehimpuls eines Elektrons	271
14.3	Berücksichtigung von äußeren elektromagnetischen Feldern sowie relativistischen Korrekturen	273
15	Atomare Systeme	280
15.1	Mehr-Teilchen-Systeme. Coulomb-Wechselwirkung zwischen Ladungsträgern in atomaren Systemen	280
15.1.1	Abspaltung der Translationsbewegung bei Atomen und Molekülen	282
15.1.2	Elektronenzustand bei fester Kernlage in Atomen, Molekülen und Festkörpern	284
15.1.3	Trennung von Elektronen- und Kernschwingungsbewegung bei Molekülen und Festkörpern	286
15.1.4	Rotationsbewegung eines Moleküls	289
15.1.5	Gesamtstruktur der Energiezustände eines Moleküls	290
15.2	Mehr-Teilchen-Spin	291
15.3	Über die Coulomb-Wechselwirkung hinausgehende Wechselwirkungen bei einem Atom	293
15.4	Relativistische Wechselwirkungen bei Atomverbänden	295
15.5	Zusammenfassende Betrachtungen im gesamten Hilbert-Raum atomarer Systeme	297
16	Das quantisierte elektromagnetische Strahlungsfeld und seine Wechselwirkung mit Ladungsträgern	300
16.1	Quantisierung des isolierten Strahlungsfeldes und resultierende Grundeigenschaften	301
16.2	Eigenschaften von Zuständen fester Photonenzahl	308
16.3	Eigenschaften von Glauber-Zuständen	310
16.4	Kohärenzeigenschaften. Quantentheoretische Korrelationsfunktionen	313
16.5	Wechselwirkung des quantisierten Strahlungsfeldes mit Ladungsträgern ...	322
16.6	Gequetschtes Licht. Yuen-Zustand	326
17	Systeme mit Positronen, Müonen und Nukleonen	330
17.1	Müonen-Atome	331
17.2	Schalenmodell der Atomkerne	333
E	Quantentheoretische Methoden und ihre Anwendungen. Erweiterung der Grundlagen	339
18	Systeme im gemischten Zustand. Dichteoperator	341
18.1	Einführung und Grundeigenschaften des Dichteoperators	342
18.2	Beschreibung physikalisch-relevanter Größen mit dem Dichteoperator	344
18.3	Zeitliches Verhalten des Dichteoperators	346
18.4	Beziehungen zwischen Dichteoperator und Entropie	347
18.4.1	Darstellung der mittleren Entropie mittels Dichteoperator	347
18.4.2	Systeme mit maximaler Entropie. Kanonisches Ensemble	350
18.5	Anwendung auf Spin-Systeme	351
18.6	Anwendung auf Photonen-Systeme	352
18.6.1	Energieverteilung der Wärmestrahlung. Chaotische Strahlung	352

18.6.2	Die Glauber-Sudarshan-Darstellung des Dichteoperators	355
18.6.3	Das Nichtklassische Licht	357
18.6.4	Lichtausbreitung durch lineare optische Anordnungen	359
19	Symmetrieeigenschaften physikalischer Systeme.	
	Anwendung gruppentheoretischer Methoden in der Quantentheorie	364
19.1	Symmetrieeigenschaften, Gruppen von unitären Transformationen und Erhaltungsgrößen	365
19.1.1	Gruppe der räumlichen Translationen	366
19.1.2	Gruppe der zeitlichen Translationen	368
19.1.3	Gruppe der dreidimensionalen Drehungen im Orts- und Spinraum	369
19.1.4	Inversionsgruppe	370
19.1.5	Poincaré- und Lorentz-Gruppe	370
19.1.6	Permutationsgruppen	370
19.2	Anwendung gruppentheoretischer Methoden zur Gewinnung quantentheoretischer Resultate	371
19.2.1	Klassifizierung und Konstruktion von Eigenzuständen auf Grund der Symmetriegruppe des Hamilton-Operators	371
19.2.2	Folgerungen für Ein-Elektronen-Zustände bei Translationssymmetrie in Kristallen	374
19.2.3	Symmetrieeigenschaften von Molekülzuständen	384
19.2.4	Energieniveau-Aufspaltung durch eine Störung mit Symmetrieverminderung	385
19.2.5	Gruppentheorie als Hilfsmittel bei der Berechnung von Matrixelementen von Operatoren	386
19.2.6	Gruppentheoretische Überlegungen bei zusammengesetzten physikalischen Systemen	388
20	Näherungsverfahren für die Lösung des Energie-Eigenwertproblems	390
20.1	Variationsverfahren	390
20.2	Schrödingersche Störungstheorie	393
20.2.1	Störungstheorie für einen nichtentarteten ungestörten Eigenwert	394
20.2.2	Störungstheorie für einen entarteten ungestörten Eigenwert	396
20.2.3	Übergang zwischen Nichtentartung und Entartung. Quasientartung	397
20.3	Anwendungen der Variationsmethode und der Schrödingerschen Störungstheorie	399
20.3.1	Wasserstoff-Molekülion	399
20.3.2	Gewinnung optimaler Ein-Teilchen-Zustände. Hartree-Gleichungen	401
20.3.3	Anharmonischer Oszillator	403
20.3.4	Spin-Bahn-Kopplung eines Elektrons in einem kugelsymmetrischen Kraftfeld	405
20.3.5	Zeeman-Effekt des Ein-Elektronen-Problems	408
20.3.6	Born-Oppenheimer-Näherung der Elektronen- und Kernbewegung in Molekülen	411
20.3.7	Brillouin-Näherung für Elektronen im Kristall	414
21	Systeme identischer Teilchen	418
21.1	Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen	418
21.2	Fermionen- und Bosonen-Systeme	421
21.3	Hartree-Fock-Gleichungen	423
21.4	Zwei-Elektronen-Systeme	427
21.4.1	Helium-Atom	427
21.4.2	Wasserstoff-Molekül	430
21.5	Besetzungszahldarstellung eines Bosonen- und eines Fermionen-Systems ..	432
21.6	Bose-Einstein- und Fermi-Dirac-Statistik. Anwendungen	436

22	Dirac-Bild. Zeitabhängige Störungsrechnung	443
22.1	Grundlagen des Dirac-Bildes	443
22.2	Zeitabhängige Störungsrechnung	446
22.3	Übergangswahrscheinlichkeit und Übergangsrate	447
22.4	Anwendungen	449
22.4.1	Emission und Absorption von Photonen. Natürliche Linienbreite	450
22.4.2	Zusammenhang zwischen elektrischer Polarisierung und Feldstärke	454
23	Streuprozesse	460
23.1	Grundbegriffe der Streutheorie	460
23.2	Methode der zeitabhängigen Störungstheorie	462
23.3	Methode der Greenschen Funktion	465
23.3.1	Aufstellung der Lippmann-Schwinger-Gleichung für den Streuzustand	465
23.3.2	Greenscher Operator und Greensche Funktion	466
23.3.3	Streuamplitude und differentieller Streuquerschnitt	468
23.3.4	Streuung schneller Elektronen an schweren Atomen	471
23.4	Streuamatrix-Theorie	472
23.5	Methode der Wegintegral-Quantisierung und ihre Anwendung in der Streutheorie	476
23.5.1	Darstellung eines Propagators als Wegintegral	477
23.5.2	Anwendung der Wegintegral-Methode in der Streutheorie	480
24	Besetzungszahldarstellung von atomaren Systemen	483
24.1	Ein-Elektronen-Atom	483
24.2	Allgemeine atomare Systeme	486
24.3	Anwendungen	487
24.3.1	Grundsätzliches zum Zwei-Niveau-System	487
24.3.2	Wechselwirkung des Zwei-Niveau-Systems mit dem elektromagnetischen Feld	487
24.3.3	Photonendetektor auf der Basis des äußeren Photoeffektes	488
25	Dissipation und Fluktuation. Wechselwirkung zwischen dynamischen und dissipativen Systemen	493
25.1	Charakterisierung des dissipativen Systems	494
25.2	Kopplung eines harmonischen Oszillators an ein dissipatives System	495
25.3	Kopplung eines Zwei-Niveau-Systems an ein dissipatives System	499
25.4	Physikalische Interpretation und Anwendung	501
25.4.1	Dynamische und dissipative Systeme. Wechselwirkungsmechanismen	501
25.4.2	Bewegungsgleichungen. Dämpfungsglieder. Relaxationszeiten	502
25.4.3	Simultane Wirkung stochastischer und zeitlich determinierter Kräfte beim Laser	506
26	Quantenfeldtheorie	512
26.1	Grundlagen des quantenfeldtheoretischen Formalismus	513
26.1.1	Operatoren der kanonischen Quantenfeldtheorie	513
26.1.2	Analyse von Feldern mittels vollständiger Orthonormalsysteme von Eigenfunktionen	517
26.1.3	Quantenfeldtheorie in Besetzungszahldarstellung (Teilchenzahldarstellung)	519
26.1.4	Hilbert-Raum für feste Gesamtteilchenzahl und Fock-Raum	520
26.2	Physikalische Aussagen	521
26.2.1	Observable	521
26.2.2	Übergang vom quantisierten Schrödinger-Feld mit innerer Wechselwirkung zur Mehr-Teilchen-Quantenmechanik mit Wechselwirkung zwischen den Teilchen	526

26.3	Anwendung auf Quasiteilchen (Phononen)	527
26.3.1	Massenpunktmodell der Phononen	528
26.3.2	Kontinuumsmodell der Phononen	530
26.4	Anwendung auf ausgewählte Elementarteilchen. Aspekte der Wechselwirkung	532
26.4.1	Quantisierte Felder für ausgewählte Elementarteilchen	532
26.4.1.1	Mesonfeld (Klein-Gordon-Feld)	532
26.4.1.2	Elektron-Positron-Feld (Dirac-Feld)	535
26.4.1.3	Nukleonenfeld	540
26.4.1.4	Neutrino-feld (Weyl-Feld)	540
26.4.2	Nichtrelativistische Näherung des Dirac-Feldes bei Wechselwirkung mit äußeren statischen elektrischen und magnetischen Feldern	541
26.4.3	Wechselwirkung von Feldern	546
26.4.3.1	Quantenelektrodynamik und Feynman-Diagrammtechnik	547
26.4.3.2	Nukleonen-Mesonen-Wechselwirkung	556
26.4.3.3	Vier-Fermionen-Kopplung (β -Zerfall)	557
26.4.4	Kopplungskonstanten bei starker, elektromagnetischer und schwacher Wechselwirkung	557
 Anhang		 563
 A 1 Erweiterter Hilbert-Raum als mathematische Grundlage der Dirac-Formulierung		 563
A 1.1	Zu verwendende Vektor-Räume	563
A 1.1.1	Hilbert-Raum	563
A 1.1.1.1	Linearität und Komplexität	563
A 1.1.1.2	Hermitesche Metrik	564
A 1.1.1.3	Abzählbar-unendliche Dimension. Separabilität	566
A 1.1.1.4	Vollständigkeit	566
A 1.1.2	Duale Vektor-Räume	567
A 1.1.3	Erweiterung des Hilbert-Raumes	567
A 1.1.4	Rechenregeln für den verwendeten Vektor-Raum (erweiterten Hilbert-Raum)	570
A 1.2	Operatoren	572
A 1.2.1	Grundlegende Eigenschaften von linearen Operatoren	572
A 1.2.2	Rechenregeln und spezielle Eigenschaften von linearen Operatoren	574
A 1.3	Eigenwertproblem linearer Operatoren	579
A 1.3.1	Allgemeine Definitionen und Aussagen	579
A 1.3.2	Eigenwertproblem hermitescher Operatoren	580
A 1.4	Produkt-Räume	583
A 1.4.1	Produkt-Raum mit 2 Teilräumen	583
A 1.4.2	Produkt-Räume mit mehr als 2 Teilräumen	584
 A 2 Diracsche Delta-Funktion		 585
A 2.1	Definition der δ -Funktion	585
A 2.1.1	Darstellung der δ -Funktion als Grenzfunktion von Funktionenfolgen	586
A 2.1.2	Fourier-Darstellung, Vollständigkeitsrelationen für Orthonormalsysteme und weitere δ -Funktionsdarstellungen	587
A 2.2	δ -Funktions-Relationen	588
A 2.3	Ableitungen der δ -Funktion und der Sprungfunktion. Transversale δ -Funktion	589

A 3	Grundbegriffe und Sätze der Gruppentheorie	591
A 3.1	Allgemeine Definitionen	591
A 3.1.1	Definition einer Gruppe	591
A 3.1.2	Klasseneinteilung der Elemente einer Gruppe	592
A 3.1.3	Untergruppen einer Gruppe	592
A 3.2	Darstellungen einer Gruppe	592
A 3.2.1	Definition der Darstellung	592
A 3.2.2	Reduzibilität und Irreduzibilität von Darstellungen	594
A 3.2.2.1	Sätze über irreduzible Darstellungen	594
A 3.3	Charaktere von Darstellungen	595
A 3.3.1	Definition des Charakters	595
A 3.3.2	Charaktere von Darstellungen	595
A 3.3.3	Relationen zwischen Charaktersystemen	596
A 3.4	Direktes Produkt von Darstellungen einer Gruppe	596
A 3.5	Projektionsoperatoren	597
A 4	Transformation auf Normalkoordinaten	598
A 5	Lorentz-Transformationen und relativistische Invarianz	601
A 5.1	Lorentz-Transformationen	601
A 5.2	Infinitesimale Lorentz-Transformationen von Feldgrößen	603
	Literaturverzeichnis	607
	Sachverzeichnis	613