
Martin O. Steinhauser

Quantenmechanik für Naturwissenschaftler

Ein Lehr- und Übungsbuch mit
zahlreichen Aufgaben und Lösungen

 Springer Spektrum

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Woraus besteht Materie?	1
1.2	Die klassische Mechanik	4
1.3	Die Lagrange-Funktion der klassischen Mechanik	5
1.4	Die kanonischen Bewegungsgleichungen	8
1.4.1	Determinismus in der klassischen Mechanik	9
1.4.2	Bewegungsgleichungen und Poisson-Klammern	10
1.5	Ausblick auf die Quantenmechanik	12
1.5.1	Quantisierung	13
1.5.2	Das Korrespondenzprinzip	13
1.5.3	Die Solvay-Konferenzen	14
1.6	Indeterminismus in der Quantenmechanik	15
1.7	Die Welleneigenschaften von Licht	16
1.7.1	Von Newton zu Maxwell	17
1.7.2	Formale Beschreibung von Wellen	19
	Zusammenfassung der Lernziele von Kap. 1	22
	Übungsaufgaben	24
	Prüfungsfragen	27
	Weiterführende Literatur	28
2	Einführung in die Quantenmechanik	29
2.1	Einleitung	30
2.2	Entwicklung der modernen Atomtheorie	35
2.2.1	Entdeckung des Elektrons	36
2.2.2	Entdeckung des Atomkerns	41
2.3	Schlüsselexperimente zur Quantenmechanik	47
2.3.1	Atomare Spektren und diskrete Energiewerte	48
2.3.2	Das Strahlungsspektrum Schwarzer Körper	54
2.3.3	Der photoelektrische Effekt	87
2.3.4	Lichtquantenhypothese von Einstein	88
2.3.5	Der Compton-Effekt	90
2.3.6	Der Franck-Hertz-Versuch	96
2.3.7	Die Einstein-Koeffizienten im Strahlungsgleichgewicht	98

2.4	Atommodelle	104
2.4.1	Das Bohr'sche Atommodell	106
2.4.2	Die Sommerfeld'sche Erweiterung des Bohr'schen Atommodells	113
2.4.3	Schwierigkeiten und Grenzen des Bohr-Sommerfeld'schen Atommodells	116
2.4.4	Rydberg-Atome	117
	Zusammenfassung der Lernziele von Kap. 2	118
	Übungsaufgaben	120
	Prüfungsfragen	141
	Weiterführende Literatur	143
3	Materiewellen und die Schrödinger-Gleichung	145
3.1	Schrödingers Wellenmechanik	147
3.1.1	Wellen- und Teilchencharakter von Licht und Materie	149
3.1.2	De-Broglie-Materiewellen	151
3.2	Wellenpakete und Wellenfunktion	154
3.2.1	Gruppen- und Phasengeschwindigkeit von Materiewellen	162
3.2.2	Normierung	165
3.2.3	Übertragung auf drei Dimensionen	166
3.2.4	Die Heisenberg'sche Unschärferelation	167
3.3	Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung	172
3.3.1	Die Schrödinger-Gleichung für Teilchen im Potenzial $V(x)$	175
3.3.2	Berechnung von Mittelwerten	177
3.3.3	Der Wahrscheinlichkeitsstrom	185
3.3.4	Stationäre Lösungen der Schrödinger-Gleichung	187
3.4	Die Lösung der Schrödinger-Gleichung für einfache Modellsysteme	190
3.4.1	Überblick über eindimensionale Potenzialprobleme	190
3.4.2	Allgemeine Aussagen bei eindimensionalen Potenzialproblemen	193
3.4.3	Das freie Teilchen	198
3.4.4	Lösungsverhalten der Wellenfunktion $\varphi(x)$	199
3.4.5	Das Eigenwertspektrum gebundener Teilchen	201
3.4.6	Das Teilchen im Kastenpotenzial (Potenzialtopf)	207
3.4.7	Der quantenmechanische Tunneleffekt	218
3.5	Zur Entstehung der Quantenmechanik	228
3.5.1	Heisenbergs Matrizenmechanik	229
3.6	Die Bedeutung der Schrödinger'schen Wellenmechanik	236
	Zusammenfassung der Lernziele von Kap. 3	237
	Übungsaufgaben	240
	Prüfungsfragen	259
	Weiterführende Literatur	262

4 Die Mathematik und die formalen Prinzipien der Quantenmechanik	263
4.1 Einführung	264
4.2 Zustandsvektor im Hilbert-Raum	268
4.3 Eigenschaften des Hilbert-Raumes	271
4.3.1 \mathcal{H} ist ein komplexer, linearer Vektorraum	272
4.3.2 \mathcal{H} ist ein unitärer Vektorraum	274
4.3.3 \mathcal{H} ist vollständig	279
4.3.4 \mathcal{H} ist separabel	280
4.3.5 Einführung des Projektionsoperators	280
4.4 Vollständige orthonormierte Basis	283
4.5 Operatoren im Hilbert-Raum	286
4.5.1 Rechenregeln, die bei der Bildung des adjungierten Operators zu beachten sind	293
4.5.2 Spezielle Operatoren	295
4.5.3 Funktionen von Operatoren	299
4.5.4 Die Dirac-Darstellung von Vektoren und Operatoren in einem vollständigen, orthonormierten Basissystem	301
4.5.5 Komponentendarstellung von Operatoren in einem VON-Basissystem	305
4.6 Eigenwerte und Eigenvektoren Hermite'scher Operatoren	312
4.6.1 Der Begriff der Entartung	313
4.6.2 Orthogonalität von Eigenvektoren	314
4.7 Die Postulate der Quantenmechanik	323
4.8 Dirac-Vektoren	328
4.8.1 Die Weyl'schen Eigendifferenziale	333
4.9 Die Dirac'sche Deltafunktion	338
4.9.1 Darstellungen und Eigenschaften der Deltafunktion	340
4.9.2 Die Fourier-Darstellung der Deltafunktion	346
4.9.3 Genauere Begründung der Deltafunktion als Distribution	349
4.9.4 Die Vollständigkeitsrelation	354
4.9.5 Die Wahrscheinlichkeitsverteilung	355
4.10 Die verallgemeinerte Heisenberg'sche Unschärferelation	359
4.10.1 Zustände minimaler Unschärfe	362
4.10.2 Diskussion der Unschärferelation	366
Zusammenfassung der Lernziele von Kap. 4	373
Übungsaufgaben	376
Prüfungsfragen	393
Weiterführende Literatur	396

5	Der lineare harmonische Oszillator	397
5.1	Die Bewegungsgleichungen	398
5.2	Algebraische Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung	400
5.2.1	Berechnung der Eigenwerte des Besetzungszahloperators N	402
5.2.2	Das Spektrum des harmonischen Oszillators	405
5.3	Der harmonische Oszillator in der Ortsdarstellung	408
5.3.1	Klassische und quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit	416
	Zusammenfassung der Lernziele von Kap. 5	418
	Übungsaufgaben	420
	Prüfungsfragen	421
6	Quantenmechanische Beschreibung der Bewegung im Zentralfeld	423
6.1	Physikalisch wichtige Fälle bei kugelsymmetrischem Potenzial	424
6.2	Die klassische Bewegung im zentralsymmetrischen Potenzial	426
6.3	Quantenmechanische Behandlung der Bewegung im Zentralpotenzial	427
6.3.1	Beweis der Vertauschbarkeit von \hat{L}^2 und \hat{H} im zentralsymmetrischen Feld	427
6.3.2	Quantenmechanische Aufspaltung des Impulsquadrats	430
6.3.3	Aufstellen einer eindimensionalen Schrödinger-Gleichung für den Radialanteil	436
6.4	Eigenvektoren und Eigenwerte von L^2 und L_z	439
6.4.1	Eigenvektoren und Eigenwerte von L^2 und L_z in darstellungsfreier Behandlung	440
6.4.2	Das Vektormodell für den Drehimpuls	447
6.4.3	Drehimpuls in der Ortsdarstellung	449
6.5	Die radiale Schrödinger-Gleichung: Das Wasserstoffproblem	458
6.5.1	Spezialisierung auf das H-Atom	459
6.6	Das Atom- und das Molekül-Orbitalmodell	472
6.7	Der Elektronenspin	476
6.7.1	Experimentelle Gründe für die Existenz des Spins	476
6.7.2	Die Spinhypothese von Uhlenbeck und Goudsmit	478
6.7.3	Die mathematische Beschreibung der Spinzustände	480
6.7.4	Darstellung der Spinoperatoren	483
	Zusammenfassung der Lernziele von Kap. 6	485
	Übungsaufgaben	488
	Prüfungsfragen	496
7	Näherungsmethoden in der Quantenmechanik	499
7.1	Übersicht	499
7.1.1	Störungstheorie	500
7.1.2	Variationsverfahren	504

7.1.3	Das WKB-Verfahren	506
7.1.4	Dem speziellen Problem angepasste Verfahren	506
7.2	Zeitunabhängige (Schrödinger'sche) Störungstheorie ohne Entartung	507
7.2.1	Störungstheorie erster Ordnung	509
7.2.2	Störungstheorie zweiter Ordnung	510
7.2.3	Zusammenfassung der Ergebnisse	513
7.3	Störungstheorie mit Entartung	515
7.3.1	Aufsuchen der adaptierten Eigenvektoren $ \varphi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$	517
7.4	Anwendung der zeitunabhängigen Störungstheorie: der Stark-Effekt beim H-Atom	519
7.4.1	Das ungestörte Wasserstoffatom	520
7.4.2	Störungstheorie ohne Entartung für den Grundzustand	521
7.4.3	Störungstheorie mit Entartung für den ersten angeregten Zustand	521
7.4.4	Diskussion der Ergebnisse beim Stark-Effekt	524
7.5	Variationsverfahren zur Bestimmung von Eigenwerten und Eigenvektoren	526
7.5.1	Näherungsweise Berechnung der Eigenwerte mit Hilfe des Variationsverfahrens	528
7.6	Hartree-Fock-Näherung für Mehr-Elektronen-Systeme	534
7.6.1	Die stationäre Schrödinger-Gleichung für allgemeine Mehr-Teilchen-Systeme	535
7.6.2	Das Hartree-Produkt	539
7.6.3	Slater-Determinanten	542
7.6.4	Berechnung der Energie: Slater-Condon-Regeln	542
7.6.5	Die Hartree-Fock-Gleichungen	545
7.6.6	Die Roothaan-Hall-Gleichungen	549
7.6.7	Lösung der Roothaan-Hall-Gleichungen	551
	Zusammenfassung der Lernziele von Kap. 7	553
	Übungsaufgaben	555
	Prüfungsfragen	562
8	Die Interpretationen und konzeptionellen Probleme der Quantenmechanik	565
8.1	Determinismus und Wahrscheinlichkeit	566
8.2	Wo liegt eigentlich das Problem?	567
8.2.1	Das Messproblem der Quantenmechanik: Schrödingers Katze	569
8.2.2	Das Doppelspaltexperiment	570
8.3	Axiomatische Beschreibung quantenmechanischer Messungen	572
8.3.1	Delayed-Choice-Experimente	576
8.4	Die orthodoxe Kopenhagener Interpretation	576
8.5	Die Ensemble-Interpretation	580
8.6	Die Viele-Welten-Interpretation	580

8.7	Die De-Broglie-Bohm-Interpretation	581
8.7.1	Die Postulate der De-Broglie-Bohm-Theorie	582
8.7.2	Die Debatte um die De-Broglie-Bohm-Theorie	584
8.8	Die Bell'sche Ungleichung und das EPR-Argument	585
8.9	Dekohärenz	588
8.9.1	Heisenberg'sche Schnitte	589
8.10	Dichteoperatoren	591
8.10.1	Eigenschaften des Dichteoperators	593
8.11	Ausblick: Was sagt die Quantenfeldtheorie zum Interpretationsproblem?	594
8.11.1	Schwierigkeiten der Teilcheninterpretation	595
8.11.2	Schwierigkeiten der Feldinterpretation	596
	Weiterführende Literatur	597
Anhang A Klassische Mechanik		599
A.1	Vorbemerkungen	599
A.2	Ein kurzer Abriss der klassischen Mechanik	600
Anhang B Indeterminismus und nicht-lineare Dynamik		603
B.1	Vorbemerkung	603
B.2	Chaotisches Verhalten klassischer Systeme	603
Anhang C Tabellen		607
C.1	SI-Basiseinheiten	607
C.2	Einige abgeleitete SI-Einheiten	608
C.3	Umrechnungsfaktoren für die Energie	608
C.4	Das Gauß'sche Maßsystem	608
C.5	Naturkonstanten	609
Anhang D Berechnung wichtiger Integrale		611
D.1	Berechnung des Integrals $\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x-1} dx$	611
D.2	Berechnung des Integrals $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx$	613
D.3	Berechnung des Slater-Typ-Integrals $\int_0^{\infty} e^{-x} x^n dx$	614
D.4	Berechnung des Gauß-Integrals $\int_0^{\infty} e^{-ax^2} x^n dx$	615
Anhang E Die Maxwell-Relationen der Thermodynamik		617
E.1	Beziehungen zwischen den thermodynamischen Potenzialen	617
Anhang F Koordinatensysteme		621
F.1	Festlegung von normierten Basisvektoren	622
F.2	Differenzialoperatoren in allgemeinen orthogonalen Koordinaten	622
F.2.1	Gradient in allgemeinen orthogonalen Koordinaten	623
F.2.2	Divergenz in allgemeinen orthogonalen Koordinaten	623
F.2.3	Rotation in allgemeinen orthogonalen Koordinaten	624

F.3	Zylinderkoordinaten	624
F.4	Kugelkoordinaten	625
Anhang G	Kombinatorik und Fakultäten	627
G.1	Der Binomialkoeffizient und die Fakultät	627
G.2	Modelle für Abzählaufgaben	628
	Literaturverzeichnis	630
	Literaturverzeichnis	631
	Namensverzeichnis	637
	Sachverzeichnis	639