

Siegmund Brandt    Hans Dieter Dahmen

---

# Quantenmechanik auf dem Personalcomputer

Übersetzt von Ralph Kretschmer

Mit 69 Abbildungen, 12 Tabellen, 284 Übungsaufgaben  
und einer Programm-Diskette

Springer-Verlag  
Berlin Heidelberg New York  
London Paris Tokyo  
Hong Kong Barcelona  
Budapest

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einführung</b>	<b>1</b>
1.1 Interquanta	1
1.2 Der Aufbau dieses Buches	2
1.3 Die Demonstrationen	3
1.4 Das Computer-Praktikum zur Quantenmechanik	4
1.5 Literatur	4
<b>2. Bewegung eines freien Teilchens in einer Dimension</b>	<b>6</b>
2.1 Physikalische Konzepte	6
2.1.1 Plancksches Wirkungsquantum. Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen	6
2.1.2 Das Wellenpaket. Gruppengeschwindigkeit. Normierung	7
2.1.3 Analogien in der Optik	8
2.2 Die erste Sitzung am Computer	10
2.2.1 Aufruf von IQ	10
2.2.2 Eine automatische Demonstration	11
2.2.3 Ein erster Dialog	11
2.2.4 Etwas Systematik	14
2.3 Die Zeitentwicklung eines Gaußschen Wellenpakets	15
2.4 Die Spektralfunktion eines Gaußschen Wellenpakets	17
2.5 Das Wellenpaket als Summe harmonischer Wellen	18
2.6 Aufgaben	21
<b>3. Gebundene Zustände in einer Dimension</b>	<b>24</b>
3.1 Physikalische Konzepte	24
3.1.1 Schrödinger-Gleichung mit Potential. Eigenfunktionen. Eigenwerte	24
3.1.2 Normierung. Diskrete Spektren. Orthonormalität	25
3.1.3 Das unendlich tiefe Kastenpotential	25
3.1.4 Der harmonische Oszillator	26
3.1.5 Das Stufenpotential	26

3.1.6	Zeitabhängige Lösungen . . . . .	28
3.1.7	Harmonische Teilchenbewegung. Kohärente Zustände. Squeezed States . . . . .	28
3.1.8	Teilchenbewegung im tiefen Kastenpotential . . . . .	30
3.2	Eigenzustände im unendlich tiefen Kastenpotential und im Potential des harmonischen Oszillators . . . . .	32
3.3	Eigenzustände im Stufenpotential . . . . .	35
3.4	Harmonische Teilchenbewegung . . . . .	38
3.5	Teilchenbewegung im unendlich tiefen Kastenpotential . . . . .	40
3.6	Aufgaben . . . . .	42
<b>4.</b>	<b>Streuung in einer Dimension . . . . .</b>	<b>48</b>
4.1	Physikalische Konzepte . . . . .	48
4.1.1	Stationäre Streuzustände. Kontinuums-Eigenzustände und -Eigenwerte. Kontinuierliche Spektren . . . . .	48
4.1.2	Zeitabhängige Lösungen der Schrödinger-Gleichung	49
4.1.3	Nach rechts und nach links laufende stationäre Wellen eines freien Teilchens . . . . .	49
4.1.4	Orthogonalität und Kontinuums-Normierung für die stationären Zustände eines freien Teilchens. Vollständigkeit . . . . .	51
4.1.5	Randbedingungen für stationäre Streuzustände in Stufenpotentialen . . . . .	51
4.1.6	Stationäre Streuzustände in Stufenpotentialen . . . . .	52
4.1.7	Konstituenten-Wellen . . . . .	53
4.1.8	Normierung der Kontinuums-Eigenzustände . . . . .	53
4.1.9	Harmonische Wellen im Stufenpotential . . . . .	54
4.1.10	Zeitabhängige Streulösungen im Stufenpotential . . . . .	54
4.1.11	Transmission und Reflexion. Unitarität. Das Argand-Diagramm . . . . .	55
4.1.12	Der Tunnel-Effekt . . . . .	56
4.1.13	Resonanzen . . . . .	57
4.1.14	Phasenverschiebung durch Reflexion an einem starken Anstieg oder Gefälle eines Potentials . . . . .	57
4.1.15	Transmissionsresonanzen bei Reflexion an „dichteren und dünneren Medien“ . . . . .	60
4.1.16	Das Quantum-Well Device und das Quantum-Effect Device . . . . .	61
4.2	Stationäre Streuzustände im Stufenpotential . . . . .	63

4.3	Streuung harmonischer Wellen durch ein Stufenpotential . . .	65
4.4	Streuung eines Wellenpakets durch ein Stufenpotential . . . .	66
4.5	Transmission und Reflexion. Das Argand-Diagramm . . . . .	69
4.6	Aufgaben . . . . .	72
4.7	Analogien in der Optik . . . . .	83
4.8	Reflexion und Brechung stationärer elektromagnetischer Wellen . . . . .	88
4.9	Reflexion und Brechung einer harmonischen Lichtwelle . . .	90
4.10	Streuung eines Lichtwellenpakets . . . . .	92
4.11	Transmission, Reflexion und das Argand-Diagramm für Lichtwellen . . . . .	94
4.12	Aufgaben . . . . .	96
<b>5.</b>	<b>Ein Zwei-Teilchen-System:</b>	
	<b>Gekoppelte harmonische Oszillatoren . . . . .</b>	<b>100</b>
5.1	Physikalische Konzepte . . . . .	100
5.1.1	Das Zwei-Teilchen-System . . . . .	100
5.1.2	Anfangsbedingung für unterscheidbare Teilchen . . .	102
5.1.3	Zeitabhängige Wellenfunktionen und Wahrscheinlichkeitsverteilungen für unterscheidbare Teilchen . . . . .	102
5.1.4	Randverteilungen für unterscheidbare Teilchen . . .	103
5.1.5	Wellenfunktionen für ununterscheidbare Teilchen. Symmetrisierung für Bosonen. Antisymmetrisierung für Fermionen . . . . .	103
5.1.6	Randverteilungen der Wahrscheinlichkeitsdichte von Bosonen und Fermionen . . . . .	105
5.1.7	Normalschwingungen . . . . .	105
5.2	Stationäre Zustände . . . . .	106
5.3	Zeitabhängigkeit globaler Größen . . . . .	107
5.4	Gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichten . . . . .	109
5.5	Randverteilungen . . . . .	111
5.6	Aufgaben . . . . .	112
<b>6.</b>	<b>Bewegung freier Teilchen in drei Dimensionen . . . . .</b>	<b>119</b>
6.1	Physikalische Konzepte . . . . .	119
6.1.1	Die Schrödinger-Gleichung eines freien Teilchens in drei Dimensionen. Der Impulsoperator . . . . .	119
6.1.2	Das Wellenpaket. Gruppengeschwindigkeit. Normierung. Das Wahrscheinlichkeits-Ellipsoid . . .	121
6.1.3	Drehimpuls. Kugelflächenfunktionen . . . . .	123

6.1.4	Die stationäre Schrödinger-Gleichung in Polarkoordinaten. Separation der Variablen. Sphärische Bessel-Funktionen. Kontinuumsnormierung. Vollständigkeit . . . . .	125
6.1.5	Partialwellenzerlegung der ebenen Welle . . . . .	126
6.1.6	Partialwellenzerlegung eines Gaußschen Wellenpakets . . . . .	127
6.2	Die harmonische ebene Welle in drei Dimensionen . . . . .	129
6.2.1	Ein kartesisches 3D-Diagramm . . . . .	129
6.2.2	Ein 3D-Polar-Diagramm . . . . .	130
6.3	Zerlegung der ebenen Welle in Kugelwellen . . . . .	132
6.4	Das dreidimensionale Gaußsche Wellenpaket . . . . .	133
6.5	Das Wahrscheinlichkeits-Ellipsoid . . . . .	135
6.6	Drehimpuls-Zerlegung eines Wellenpakets . . . . .	137
6.7	Aufgaben . . . . .	138
<b>7.</b>	<b>Gebundene Zustände in drei Dimensionen . . . . .</b>	<b>141</b>
7.1	Physikalische Konzepte . . . . .	141
7.1.1	Die Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen unter der Wirkung einer Kraft. Die Zentrifugalbarriere. Das effektive Potential . . . . .	141
7.1.2	Gebundene Zustände. Streuzustände. Diskrete und kontinuierliche Spektren . . . . .	143
7.1.3	Das unendlich tiefe Kastenpotential . . . . .	145
7.1.4	Das sphärische Stufenpotential . . . . .	145
7.1.5	Der harmonische Oszillator . . . . .	148
7.1.6	Das Coulomb-Potential. Das Wasserstoffatom . . . . .	149
7.1.7	Harmonische Teilchenbewegung . . . . .	151
7.2	Radialwellenfunktionen in einfachen Potentialen . . . . .	151
7.3	Radialwellenfunktionen im Stufenpotential . . . . .	156
7.4	Wahrscheinlichkeitsdichten . . . . .	158
7.5	Harmonische Teilchenbewegung . . . . .	162
7.6	Aufgaben . . . . .	164
<b>8.</b>	<b>Streuung in drei Dimensionen . . . . .</b>	<b>169</b>
8.1	Physikalische Konzepte . . . . .	169
8.1.1	Radiale Streuwellenfunktionen . . . . .	169
8.1.2	Rand- und Kontinuitätsbedingungen. Lösung des Systems der inhomogenen linearen Gleichungen für die Koeffizienten . . . . .	171

8.1.3	Streuung einer ebenen harmonischen Welle . . . . .	172
8.1.4	Streuamplitude und Phase. Unitarität. Das Argand-Diagramm . . . . .	176
8.2	Radialwellenfunktionen . . . . .	177
8.3	Stationäre Wellenfunktionen und Streuwellen . . . . .	180
8.4	Differentielle Wirkungsquerschnitte . . . . .	183
8.5	Streuamplitude, Phasenverschiebung, Partielle und totale Wirkungsquerschnitte . . . . .	184
8.6	Aufgaben . . . . .	188
<b>9.</b>	<b>Spezielle Funktionen der mathematischen Physik . . . . .</b>	<b>193</b>
9.1	Grundlegende Formeln . . . . .	193
9.1.1	Hermitesche Polynome . . . . .	193
9.1.2	Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators . . . . .	194
9.1.3	Legendre-Polynome und Legendre-Funktionen . . . . .	194
9.1.4	Kugelflächenfunktionen . . . . .	195
9.1.5	Bessel-Funktionen . . . . .	196
9.1.6	Sphärische Bessel-Funktionen . . . . .	197
9.1.7	Laguerresche Polynome . . . . .	199
9.1.8	Radiale Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators . . . . .	199
9.1.9	Radiale Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms . . . . .	200
9.2	Hermitesche Polynome . . . . .	200
9.3	Eigenfunktionen des eindimensionalen harmonischen Oszillators . . . . .	201
9.4	Legendre-Polynome und zugeordnete Legendre-Funktionen . . . . .	202
9.4.1	Typ 2-Graphiken – Funktionen von $x$ oder $\cos \vartheta$ . . . . .	202
9.4.2	Typ 2-Graphiken – Polardiagramme . . . . .	204
9.5	Kugelflächenfunktionen . . . . .	205
9.6	Bessel-Funktionen . . . . .	207
9.6.1	Typ 2-Graphiken . . . . .	207
9.6.2	Typ 0-Graphiken . . . . .	208
9.7	Sphärische Bessel-Funktionen . . . . .	209
9.8	Laguerresche Polynome . . . . .	210
9.8.1	Typ 2-Graphiken . . . . .	210
9.8.2	Typ 0-Graphiken . . . . .	211
9.9	Radiale Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators . . . . .	212
9.10	Radiale Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms . . . . .	213
9.11	Einfache Funktionen einer komplexen Variablen . . . . .	214
9.12	Aufgaben . . . . .	216

<b>10. Zusätzliches Material</b>	
<b>und Hinweise zur Lösung der Aufgaben</b>	218
10.1 Einheiten und Größenordnungen	218
10.1.1 Definitionen	218
10.1.2 SI-Einheiten	219
10.1.3 Skalierte Einheiten	219
10.1.4 Atomare und subatomare Einheiten	221
10.1.5 Datentabellen-Einheiten	221
10.1.6 Spezielle Skalen	223
10.2 Argand-Diagramme und Unitarität für eindimensionale Probleme	225
10.2.1 Erhaltung der Wahrscheinlichkeit und die Unitarität der Streumatrix	225
10.2.2 Zeitumkehr und die Streumatrix	228
10.2.3 Diagonalisierung der Streumatrix	229
10.2.4 Argand-Diagramme	230
10.2.5 Resonanzen	232
10.3 Hinweise und Lösungen zu den Aufgaben	235
<b>Anhang A. Eine systematische Einführung in IQ</b>	265
A.1 Dialog zwischen Benutzer und IQ	265
A.1.1 Ein einfaches Beispiel	265
A.1.2 Das allgemeine Befehlsformat	268
A.1.3 Die Deskriptor-Datei	269
A.1.4 Der Deskriptor (-Datensatz)	273
A.1.5 Der PLOT-Befehl	275
A.1.6 Der STOP-Befehl	276
A.1.7 HELP: Die Befehle HE und PH	276
A.2 Koordinatensysteme und Transformationen	277
A.2.1 Die verschiedenen Koordinatensysteme	277
A.2.2 Definition der Transformationen	279
A.3 Die verschiedenen Graphiktypen	284
A.3.1 Auswahl eines Graphiktyps: Der Befehl CH	284
A.3.2 Kartesische 3D-Graphiken (Typ 0-Graphiken)	284
A.3.3 3D-Polar-Graphiken (Typ 1-Graphiken)	285
A.3.4 2D-Graphiken (Typ 2-Graphiken)	287
A.3.5 3D-Balken-Graphiken (Typ 3-Graphiken)	290
A.3.6 Spezielle 3D-Graphiken (Typ 10-Graphiken)	291
A.4 Der Hintergrund in den Graphiken	292
A.4.1 Boxen und Koordinatenachsen: Der Befehl BO	292
A.4.2 Skalen	293

A.4.3	Pfeile	296
A.4.4	Text und Zahlen	298
A.4.5	Mathematische Symbole und Formeln	300
A.5	Weitere Befehle	302
A.5.1	Linienarten	302
A.5.2	Mehrfach-Graphiken	304
A.5.3	Kombinierte Graphiken	305
A.5.4	Benutzung verschiedener Ausgabegeräte	306
A.5.5	Die verschiedenen Betriebsarten	307
A.5.6	Definition physikalischer Variablen: Die Befehle V0 bis V9	310
A.5.7	Reservierte Befehle	310
<b>Anhang B.</b>	<b>Installation von IQ</b>	<b>311</b>
B.1	Hardware-Voraussetzungen	311
B.2	Betriebssystem-Voraussetzungen	311
B.3	Disketten-Format	312
B.4	Installation	312
B.5	Umformatierung von IQ für verschiedene Diskettentypen	313
<b>Anhang C.</b>	<b>Listen aller verfügbaren Dateien</b>	<b>314</b>
C.1	Befehls-Dateien	314
C.2	Programm-Dateien	314
C.3	Deskriptor-Dateien für Beispiele und Aufgaben	315
C.4	Befehlseingabe-Dateien und zugeordnete Deskriptor-Dateien für Demonstrationen	315
C.5	Daten-Dateien	316
C.6	Help-Dateien	316
<b>Anhang D.</b>	<b>Graphische Ausgabegeräte und Meta-Dateien</b>	<b>317</b>
<b>Verzeichnis der IQ-Befehle</b>		<b>323</b>
<b>Stichwortverzeichnis</b>		<b>325</b>