

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

1. Einführung	1
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
2. Bewegung eines freien Teilchens in einer Dimension	6
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
3. Gebundene Zustände in einer Dimension	24
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
4.	Streuung in einer Dimension	48
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
5.	Ein Zwei-Teilchen-System:	
	Gekoppelte harmonische Oszillatoren	100
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
6.	Bewegung freier Teilchen in drei Dimensionen	119
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
7.	Gebundene Zustände in drei Dimensionen	141
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
8.	Streuung in drei Dimensionen	169
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
9.	Spezielle Funktionen der mathematischen Physik	193
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

10. Zusätzliches Material

und Hinweise zur Lösung der Aufgaben	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

Anhang A. Eine systematische Einführung in IQ 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
Anhang B.	Installation von IQ	311
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
Anhang C.	Listen aller verfügbaren Dateien	314
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
Anhang D.	Graphische Ausgabegeräte und Meta-Dateien	317
Verzeichnis der IQ-Befehle		323
Stichwortverzeichnis		325