Wolfgang Nolting

Grundkurs Theoretische Physik

5 Quantenmechanik

Teil 2: Methoden und Anwendungen

Grundkurs Theoretische Physik

Von Wolfgang Nolting

1 Klassische Mechanik

Mathematische Vorbereitung – Mechanik des freien Massenpunktes – Mechanik der Mehr-Teilchen-Systeme – Der starre Körper

2 Analytische Mechanik

Lagrange-Mechanik – Hamilton-Mechanik – Hamilton-Jacobi-Theorie

3 Elektrodynamik

Mathematische Vorbereitung – Elektrostatik – Magnetostatik – Elektrodynamik

4 Spezielle Relativitätstheorie, Thermodynamik

Spezielle Relativitätstheorie: Grundlagen – Kovariante vierdimensionale Formulierung – Thermodynamik: Grundbegriffe – Hauptsätze – Thermodynamische Potentiale – Phasen und Phasenübergänge

5 Quantenmechanik

Teil 1: Grundlagen

Induktive Begründung der Wellenmechanik – Schrödinger-Gleichung – Grundlagen der Quantenmechanik (Dirac-Formalismus) – Einfache Modellsysteme

Teil 2: Methoden und Anwendungen

Quantentheorie des Drehimpulses – Zentralpotential – Näherungsmethoden – Mehr-Teilchen-Systeme – Streutheorie

6 Statistische Physik

Klassische Statistische Physik – Quantenstatistik – Quantengase – Phasenübergänge

7 Viel-Teilchen-Theorie

Die zweite Quantisierung – Viel-Teilchen-Modellsysteme – Green-Funktion – Wechselwirkende Teilchen-Systeme – Störungstheorie ($T = 0$) – Störungstheorie bei endlichen Temperaturen

Wolfgang Nolting

Grundkurs Theoretische Physik 5 Quantenmechanik

Teil 2: Methoden und Anwendungen

Mit 53 Abbildungen und 110 Aufgaben
mit vollständigen Lösungen

3. Auflage

Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH

Prof. Dr. rer. nat. W. Nolting
Humboldt-Universität Berlin

Die 1. und 2. Auflage des Buches erschienen 1993
im Verlag Zimmermann-Neufang, Ulmen

Alle Rechte vorbehalten

© Springer Fachmedien Wiesbaden 1997

Ursprünglich erschienen bei Friedr. Vieweg & Sohn

Verlagsgesellschaft mbH, Braunschweig/Wiesbaden, 1997

Der Verlag Vieweg ist ein Unternehmen der Bertelsmann Fachinformation GmbH.

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung des Verlags unzulässig und strafbar. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Umschlag: Klaus Birk, Wiesbaden
Gedruckt auf säurefreiem Papier

ISBN 978-3-528-16938-1
DOI 10.1007/978-3-663-14691-9

ISBN 978-3-663-14691-9 (eBook)

VORWORT

Zur Zielsetzung des **Grundkurs: Theoretische Physik**, insbesondere für das Teilgebiet der Quantenmechanik, habe ich bereits im Vorwort zum Teil 1 Stellung bezogen. An dieser hat sich natürlich auch für den nun vorliegenden zweiten Teil nichts geändert. Die Fülle des Stoffes hat es notwendig gemacht, die Darstellung der Quantenmechanik auf zwei Bände zu verteilen, wobei die beiden Teile allerdings als Einheit zu sehen sind. Äußeres Zeichen dafür ist die fortlaufende Kapitelnummerierung.

Der erste Teil befaßte sich mit elementaren Grundlagen und einigen ersten Anwendungen auf relativ einfache (eindimensionale) Potentialprobleme. Den vorliegenden zweiten Teil beginnen wir mit der Untersuchung der wichtigen quantenmechanischen Observablen **Drehimpuls**. Wir werden jeden Vektoroperator, dessen hermitesche Komponenten einen bestimmten Satz von fundamentalen Kommutatorrelationen erfüllen, als *Drehimpuls* bezeichnen (Kap. 5.1). Dazu zählt neben dem aus der Klassischen Mechanik bekannten **Bahndrehimpuls**, den wir mit Hilfe des *Korrespondenzprinzips* in die Quantenmechanik einführen können, auch der *klassisch nicht verständliche Spin*, für den sich keine solche Analogiebetrachtung anbietet. Man kann sich damit begnügen, ihn gewissermaßen als *empirische Notwendigkeit* zu postulieren und die sich daraus ergebenden Eigenschaften und Konsequenzen zu analysieren (Kap. 5.2). Da sich **Spin**, **magnetisches Spinmoment** und die **Spin-Bahn-Wechselwirkung** als nur relativistisch begründbare Eigenschaften herausstellen, benötigt ihre strenge Herleitung die relativistische **Dirac-Theorie** (Kap. 5.3). Die Spin-Bahn-Wechselwirkung wird uns ferner die Motivation dafür liefern, auch über die Gesetzmäßigkeiten bei der Addition von Drehimpulsen nachzudenken (Kap. 5.4).

Mit der Einführung des Drehimpulses sind die wesentlichen Stützen des abstrakten Gerüsts der Quantentheorie eingeführt, so daß wir uns in den nächsten Kapiteln den mehr anwendungsorientierten Problemen zuwenden können. Das beginnt in Kapitel 6 mit den wichtigen **Zentralpotentialen**. Für die historische Entwicklung der Quantenmechanik hat insbesondere die Theorie des **Wasserstoffatoms** eine entscheidende Rolle gespielt. Das Hüllenelektron bewegt sich im Coulomb-Feld des positiv geladenen Wasserstoffkerns (Proton), unterliegt damit dem Einfluß eines speziellen Zentralpotentials, dem insbesondere auch wegen seiner *historischen Bedeutung* in diesem Band ein relativ breiter Raum gewidmet wird.

Nur wenige (realistische) Probleme der Theoretischen Physik lassen sich mathematisch streng lösen. Das *sinnvolle Approximieren* einer nicht erreichbaren exakten Lösung bereitet erfahrungsgemäß dem Lernenden nicht unerhebliche Schwierigkeiten. Wir besprechen in Kapitel 7 deshalb eine Reihe von etablierten, vom Konzept her recht unterschiedlichen Methoden, das **Variationsver-**

fahren (Kap. 7.1), die verschiedenen Formen der **Störungstheorie** (Kap. 7.2, 7.3) und die semiklassische **WKB-Methode** (Kap. 7.4). In der aktuellen wissenschaftlichen Forschung steht man häufig vor der Aufgabe, eigene problem-spezifische Approximationsverfahren entwickeln zu müssen. Auch dabei hilft das subtile Verstehen der Standardverfahren und die genaue Kenntnis ihrer Gültigkeitsbereiche.

Die bis zu diesem Punkt entwickelte Quantentheorie ist genaugenommen eine Ein-Teilchen-Theorie, wohingegen die uns umgebende *Welt* aus wechselwirkenden Viel-Teilchen-Systemen aufgebaut ist. Wir werden deshalb zu untersuchen haben (Kap. 8), was bei der Behandlung von Mehr-Teilchen-Systemen zusätzlich zu beachten ist. Die Abgrenzung von **unterscheidbaren** gegenüber **identischen Teilchen** wird sich als entscheidend wichtig herausstellen und auf das im Konzept der Klassischen Physik *nicht erklärbare Prinzip der Ununterscheidbarkeit* identischer Teilchen führen. Dessen gravierendste Konsequenz ist das **Pauli-Prinzip**, durch das unter anderem der gesamte Aufbau der Materie reguliert wird. – Für die Beschreibung von Viel-Teilchen-Systemen erweist sich der Formalismus der **zweiten Quantisierung** als elegant und vorteilhaft. Moderne Forschungsliteratur ist ohne Kenntnis desselben kaum noch lesbar. Er wird insbesondere im siebten Band des **Grundkurs: Theoretische Physik** fast ausschließlich benutzt werden. Es erschien mir deshalb sinnvoll, diese Methode sehr detailliert zu besprechen.

Das abschließende Kapitel 9 befaßt sich mit der **Streutheorie**, die ein wichtiges Anwendungsgebiet der Quantenmechanik darstellt. Über mikroskopische Streu-(Stoß-)prozesse lassen sich weitgehende Aufschlüsse über elementare *Wechselwirkungspotentiale* gewinnen, wenn es der Theorie gelingt, Verbindungen zwischen diesen und den experimentell zugänglichen **Wirkungsquerschnitten** herzustellen.

Es ist mir bei der Darstellung der Quantenmechanik, ebensowenig wie bei den in den vorangegangenen Bänden besprochenen Disziplinen, nicht so sehr *auf Vollständigkeit* angekommen, als vielmehr auf eine möglichst leicht verständliche Einführung in die Grundprinzipien und auf das Erlernen von typischen Lösungstechniken. Ich erwähne deshalb auch an dieser Stelle noch einmal, daß ich das selbständige Lösen von Übungsaufgaben zum *wirklichen Verstehen* der Theorie für unverzichtbar halte.

Valladolid, im März 1993

Wolfgang Nolting

INHALTSVERZEICHNIS

5 Quantentheorie des Drehimpulses	1
5.1 Bahndrehimpuls	2
5.1.1 Drehimpuls und Korrespondenzprinzip	2
5.1.2 Drehungen und Drehimpulsoperator	6
5.1.3 Vertauschungsrelationen	11
5.1.4 Eigenwertproblem	13
5.1.5 Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses	20
5.1.6 Eigenfunktionen in Ortsdarstellung	24
5.1.7 Aufgaben	30
5.2 Spin	34
5.2.1 Operator des magnetischen Moments	34
5.2.2 Magnetisches Moment und Drehimpuls	36
5.2.3 Hilbert-Raum des Spins	42
5.2.4 Spin $S = \frac{1}{2}$	46
5.2.5 Aufgaben	51
5.3 Relativistische Theorie des Elektrons	53
5.3.1 Dirac-Gleichung	53
5.3.2 Diracscher Spinoperator	59
5.3.3 Elektronenspin (Pauli-Theorie)	63
5.3.4 Spin-Bahn-Wechselwirkung	67
5.3.5 Aufgaben	74
5.4 Addition von Drehimpulsen	75
5.4.1 Gesamtdrehimpuls	75
5.4.2 Quantenzahlen des Gesamtdrehimpulses	78
5.4.3 Clebsch-Gordan-Koeffizienten	82
5.4.4 Aufgaben	85
5.5 Kontrollfragen	86
6 Zentralpotential	91
6.1 Allgemeine Aussagen	92
6.1.1 Radialgleichung	92
6.1.2 Lösungsstruktur	97
6.1.3 Aufgaben	98
6.2 Coulomb-Potential	100
6.2.1 Diskretes Energiespektrum	100
6.2.2 Eigenfunktionen der gebundenen Zustände	107
6.2.3 Laguerre-Polynome	110
6.2.4 Wahrscheinlichkeiten, Erwartungswerte	112
6.2.5 Kernmitbewegung; Zweikörperproblem	117
6.2.6 Aufgaben	121
6.3 Kugelsymmetrischer Potentialtopf	123

6.3.1	Radialgleichung	123
6.3.2	Bessel-Funktionen	124
6.3.3	Gebundene Zustände	129
6.3.4	Kontinuumszustände	132
6.3.5	Aufgaben	134
6.4	Das freie Teilchen	136
6.5	Kontrollfragen	139
7	Näherungsmethoden	142
7.1	Variationsverfahren	143
7.1.1	Extremalprinzip	143
7.1.2	Ritzsches Verfahren	145
7.1.3	Hartree-Gleichungen	148
7.1.4	Aufgaben	151
7.2	Zeitunabhängige Störungstheorie	153
7.2.1	Störung eines nicht-entarteten Niveaus	155
7.2.2	Störung eines entarteten Niveaus	158
7.2.3	Quasientartung	163
7.2.4	Störungstheoretische Grundformel	167
7.2.5	Brillouin-Wignersche Störreihe	170
7.2.6	Aufgaben	171
7.3	Zeitabhängige (Diracsche) Störungstheorie	174
7.3.1	Grundgedanken	174
7.3.2	Übergangswahrscheinlichkeit	179
7.3.3	Fermi's Goldene Regel	182
7.3.4	Periodische Störungen	186
7.3.5	Aufgaben	188
7.4	Quasiklassische Näherung (WKB-Verfahren)	190
7.4.1	Der " $\hbar \rightarrow 0$ "-Grenzfall der Wellenmechanik	191
7.4.2	WKB-Methode	194
7.4.3	Klassische Umkehrpunkte	197
7.4.4	Langer-Verfahren	200
7.4.5	Phasenintegralquantisierung	209
7.4.6	Mathematischer Zusatz: Besselsche Differentialgleichung	210
7.4.7	Aufgaben	214
7.5	Kontrollfragen	215
8	Mehr-Teilchen-Systeme	218
8.1	Unterscheidbare Teilchen	219
8.1.1	Hilbert-Raum zweier unterscheidbarer Teilchen	219
8.1.2	Observable im Produktraum	223
8.1.3	Systeme aus N unterscheidbaren Teilchen	226
8.1.4	Aufgaben	229

8.2	Identische Teilchen	229
8.2.1	Prinzip der Ununterscheidbarkeit	230
8.2.2	Observable und Zustände	233
8.2.3	Hilbert-Raum	236
8.2.4	Basiszustände	239
8.2.5	Besetzungszahldarstellung	241
8.2.6	Pauli-Prinzip	243
8.2.7	Aufgaben	247
8.3	Zweite Quantisierung	249
8.3.1	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren	250
8.3.2	Operatoren in zweiter Quantisierung	256
8.3.3	Spezielle Operatoren	261
8.3.4	Aufgaben	264
8.4	Anwendungen	266
8.4.1	Hartree-Fock-Gleichungen	266
8.4.2	Wasserstoffmolekül	274
8.4.3	Heliumatom	279
8.4.4	Aufgaben	288
8.5	Kontrollfragen	289
9	Streutheorie	294
9.1	Grundbegriffe	295
9.1.1	Modell des Streuprozesses	295
9.1.2	Formulierung des Streuproblems	298
9.1.3	Aufgaben	302
9.2	Partialwellenmethode	303
9.2.1	Zerlegung nach Partialwellen	303
9.2.2	Streuung an der harten Kugel	307
9.2.3	Streuung langsamer Teilchen am Potentialtopf	312
9.2.4	Resonanzstreuung	316
9.2.5	s-Streuung am Potentialtopf	318
9.2.6	Integraldarstellung für Streuphasen	321
9.2.7	Aufgaben	324
9.3	Integralgleichungen für Streuprobleme	325
9.3.1	Integralform der Streuamplitude	325
9.3.2	Bornsche Reihe	329
9.3.3	Aufgaben	332
9.4	Formale Streutheorie	334
9.4.1	Lippmann-Schwinger-Gleichung	334
9.4.2	S- und T-Matrix	339
9.5	Kontrollfragen	347

Anhang: Lösungen der Übungsaufgaben	350
Kapitel 5.1.7	350
Kapitel 5.2.5	363
Kapitel 5.3.5	371
Kapitel 5.4.4	375
Kapitel 6.1.3	381
Kapitel 6.2.6	385
Kapitel 6.3.5	391
Kapitel 7.1.3	405
Kapitel 7.2.6	412
Kapitel 7.3.5	428
Kapitel 7.4.6	438
Kapitel 8.1.4	443
Kapitel 8.2.7	445
Kapitel 8.3.4	451
Kapitel 8.4.4	458
Kapitel 9.1.3	468
Kapitel 9.2.7	469
Kapitel 9.3.3	473
Stichwörterverzeichnis	485