

# Inhaltsverzeichnis

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>1</b> | <b>Warum Quantentheorie? Festkörperphysikalische Aspekte</b>  | <b>1</b>  |
| 1.1      | Problemstellung   | 1         |
| 1.2      | Die Quantentheorie der spezifischen Wärme nach Einstein   | 3         |
| 1.3      | Warum Quantenfeldtheorie des Festkörpers?   | 4         |
| <b>2</b> | <b>Zu den Beziehungen zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik</b>                           | <b>7</b>  |
| <b>3</b> | <b>Grundbegriffe der klassischen Mechanik</b>   | <b>13</b> |
| 3.1      | Newton's Darstellung der klassischen Mechanik   | 13        |
| 3.1.1    | Die Prinzipien der Newtonschen Mechanik   | 14        |
| 3.1.2    | Der lineare ungedämpfte harmonische Oszillator nach Newton, Lagrange und Hamilton                     | 18        |
| 3.1.3    | Erzwungene Schwingungen durch eine zeitabhängige äußere Kraft   | 25        |
| 3.1.4    | Erzwungene Schwingungen durch parametrische Anregung  | 26        |
| 3.1.5    | Beispiel: Gekoppelte Oszillatoren = Gitterschwingungen  | 26        |
| 3.2      | Eulers Darstellung der Klassischen Mechanik   | 30        |
| 3.2.1    | Die Körper und ihre allgemeinen Eigenschaften – Eulers Ausschließungsprinzip                          | 32        |
| 3.2.2    | Zustandserhaltung. Die Eulerschen Axiome  | 33        |
| 3.2.3    | Eulers Weltmodelle *  | 34        |
| 3.2.4    | Zustandsänderungen I. Der Zuwachs der Geschwindigkeit. Eulers Hauptprinzip der Zustandsänderung       | 35        |
| 3.2.5    | Zustandsänderungen II. Der Zuwachs des Quadrates der Geschwindigkeit: Lebendige Kraft und Wirksamkeit | 36        |
| 3.2.6    | Eulers Methode der Maxima und Minima I. Das Prinzip der kleinsten Wirkung *                           | 38        |
| 3.3      | Konservative Systeme  | 39        |
| 3.3.1    | Die Erhaltung der Energie nach Helmholtz  | 40        |
| 3.3.2    | Die Axiome der Zustandserhaltung  | 43        |
| 3.3.3    | Arbeit und Arbeitsvorrat – Der Absolutwert der Energie  | 44        |

|       |   |    |
|-------|---|----|
| 3.3.4 | Der Zusammenhang zwischen Energie und Ausdehnung  | 45 |
| 3.3.5 | Eulers Methode der Maxima und Minima II.<br>Interne und externe Systemparameter   | 47 |
| 3.3.6 | Mögliche und nicht mögliche Konfigurationen   | 48 |
| 3.4   | Anwendung der Eulerschen Prinzipien<br>der Zustandsänderung auf konservative Systeme  | 50 |
| 3.4.1 | Die Prinzipien der Zustandsänderung für die Körper  | 50 |
| 3.4.2 | Die Prinzipien der Zustandsänderung<br>für konservative Systeme   | 51 |
| 3.4.3 | Separation der internen und externen Parameter<br>am Beispiel des harmonischen Oszillators *  | 54 |
| 4     | <b>Von der Klassischen Mechanik zur Quantenmechanik</b>   | 57 |
| 4.1   | Schrödingers Ableitung der Wellengleichung  | 58 |
| 4.2   | Quantisierung als Auswahlproblem I.<br>Voraussetzungsfreie Ableitung<br>der stationären Schrödinger-Gleichung                       | 61 |
| 4.2.1 | Problemstellung   | 61 |
| 4.2.2 | Die Beziehung zwischen Klassischer<br>und Quantenmechanik als Auswahlproblem  | 62 |
| 4.2.3 | Systeme mit unbeschränkten (Impuls-)Konfigurationen   | 67 |
| 4.2.4 | Die nichtklassische Darstellung der Energie   | 69 |
| 4.2.5 | Die stationäre Schrödinger-Gleichung  | 74 |
| 4.3   | Quantisierung als Auswahlproblem II.<br>Eine <i>nicht</i> klassische Methode zur Lösung<br>der stationären Schrödinger-Gleichung    | 77 |
| 4.3.1 | Rationalisierung der stationären Schrödinger-Gleichung.<br>Nicht-klassischer Charakter der Energie                                  | 77 |
| 4.3.2 | Die klassische Methode: Lösung als Eigenwertproblem   | 79 |
| 4.3.3 | Auswahl der mathematisch ausgezeichneten Zustände<br>( $E/\alpha\omega$ halbzahlig)   | 80 |
| 4.3.4 | Auswahl der physikalisch ausgezeichneten Zustände<br>( $E/\alpha\omega$ positiv)  | 82 |
| 4.3.5 | Einsteinscher Oszillator – Bedeutung des Parameters $\alpha$  | 83 |
| 4.3.6 | Wechselwirkungsfreier Körper –<br>de Broglie-Beziehung $\lambda = h/p$  | 84 |
| 4.3.7 | Energie <i>versus</i> Ausdehnung<br>eines quantenmechanischen Systems *   | 86 |
| 4.4   | Von der Amplituden- zur eigentlichen Wellengleichung:<br>Voraussetzungsfreie Begründung<br>der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung | 87 |
| 4.4.1 | Die Zeitabhängigkeit der stationären Zustände   | 88 |
| 4.4.2 | Die Zustandsänderungs- und Bewegungsgleichungen<br>im stationären Fall  | 89 |

|          |  |            |
|----------|--|------------|
| 4.4.3    | Die Prinzipien der Zustandsänderung<br>für quantenmechanische Systeme .....  | 92         |
| 4.4.4    | Die Zustandsänderungsgleichungen im<br>nichtstationären Fall .....   | 92         |
| 4.4.5    | Die Bewegungsgleichungen im nichtstationären Fall ....   | 94         |
| 4.4.6    | Der invariante Ausdruck im nichtstationären Fall * ....  | 95         |
| 4.5      | Symmetrie der Begrenzungsfunktionen –<br>Symmetrie der Wellenfunktionen .....  | 96         |
| 4.5.1    | Die Theoreme von Noether, von Neumann und Wigner .   | 97         |
| 4.5.2    | Symmetrie des Hamilton-Operators –<br>Symmetrie der Begrenzungsfunktionen –<br>Symmetrie des Betrages der Wellenfunktionen .....     | 98         |
| 4.5.3    | Symmetrie des Betrages der Wellenfunktionen –<br>Symmetrie der Wellenfunktionen selbst –<br>Geometrische Phasen .....                | 99         |
| 4.5.4    | Eichsymmetrie * .....  | 100        |
| 4.6      | Beispiel: Bloch-Elektronen .....   | 103        |
| 4.6.1    | Symmetrie des Kristallgitters –<br>Symmetrie der Wellenfunktion .....  | 103        |
| 4.6.2    | Lokalisierte Wellenfunktionen.<br>Näherung der festen Bindung .....  | 106        |
| <b>5</b> | <b>Vom Ein-Teilchen- zum Viel-Teilchen-System .....</b>  | <b>111</b> |
| 5.1      | Systeme aus zwei Teilsystemen .....  | 111        |
| 5.1.1    | Der allgemeine Fall .....  | 111        |
| 5.1.2    | Klassische Systeme aus zwei gleichen Körpern .....   | 113        |
| 5.1.3    | Quantensysteme aus zwei gleichen Teilchen .....  | 114        |
| 5.2      | Konsequenzen der Permutationssymmetrie der Wellenfunktion  | 117        |
| 5.2.1    | Bosonen und Fermionen .....  | 117        |
| 5.2.2    | Die Besetzung von Zuständen: Austausch-Loch .....  | 118        |
| 5.2.3    | Die Besetzung von Zuständen:<br>Pauli-Verbot und Aufbau-Prinzip .....  | 118        |
| 5.2.4    | Austausch-Wechselwirkung .....   | 119        |
| 5.2.5    | Verschränktheit * .....  | 121        |
| 5.2.6    | Ununterscheidbarkeit – Identität gleicher Teilchen * ...   | 121        |
| <b>6</b> | <b>Die Besetzungszahl-Darstellung für Bosonen .....</b>  | <b>123</b> |
| 6.1      | Begründung der Besetzungszahl-Darstellung für Bosonen ....   | 123        |
| 6.1.1    | Das Besetzungsproblem in der Planckschen<br>Quantenhypothese. Die sukzessive Besetzung<br>eines Oszillators mit Energiequanten ..... | 123        |
| 6.1.2    | Besetzungszahl-Darstellung – Fock-Raum .....   | 125        |
| 6.1.3    | Wichtige Eigenschaften der Erzeugungs-<br>und Vernichtungsoperatoren .....   | 126        |

|       |  |     |
|-------|--|-----|
| 6.1.4 | Der abstrakte harmonische Oszillator .....   | 127 |
| 6.1.5 | Die Bra-Ket-Darstellung .....  | 128 |
| 6.1.6 | Gleiche Oszillatoren in Besetzungszahl-Darstellung ....                              | 129 |
| 6.2   | Kohärente Zustände I .....   | 130 |
| 6.2.1 | Die kohärente Überlagerung<br>von Besetzungszahl-Zuständen .....                     | 130 |
| 6.2.2 | Die Eigenzustände der Operatoren $b$ und $b^+$ .....                                 | 131 |
| 6.2.3 | Der verschobene harmonische Oszillator als Prototyp<br>für Elementaranregungen ..... | 132 |
| 6.2.4 | Dynamik des verschobenen harmonischen Oszillators * ..                               | 135 |
| 6.3   | Beispiel: Gekoppelte gleichartige quantenmechanische Pendel<br>– Phononen .....      | 136 |
| 6.3.1 | Quantisierung der Gitterschwingungen .....   | 136 |
| 6.3.2 | Phononen als einfachste Quasiteilchen .....  | 138 |
| 6.3.3 | Strukturelle Phasenübergänge<br>als Bose-Einstein-Kondensation * .....               | 140 |
| 7     | <b>Die Besetzungszahl-Darstellung für Fermionen</b> .....                            | 145 |
| 7.1   | Begründung der Besetzungszahl-Darstellung für Fermionen ...                          | 145 |
| 7.1.1 | Die Besetzungszahl-Operatoren für Fermionen .....                                    | 145 |
| 7.1.2 | Systeme mit zwei gleichen Fermionen .....  | 147 |
| 7.1.3 | Zwei-Niveau-Systeme. Quasi-Spin-Formalismus * .....                                  | 147 |
| 7.2   | Kohärente Zustände II .....  | 149 |
| 7.2.1 | Der thermische Phasen-Zustand .....  | 149 |
| 7.2.2 | Dynamik statistischer Gesamtheiten –<br>Die Dichtematrix * .....                     | 150 |
| 7.3   | Beispiel: Löcher (Defektelektronen) in Halbleitern .....                             | 152 |
| 8     | <b>Vom Viel-Teilchen-System zur Quantenfeldtheorie</b> .....                         | 155 |
| 8.1   | Problemstellung und Übersicht .....  | 155 |
| 8.2   | Klassische kanonische Feldtheorie<br>und Normalmoden-Entwicklung .....               | 157 |
| 8.2.1 | Kanonischer Formalismus<br>für klassische verteilte Systeme .....                    | 157 |
| 8.2.2 | Elektromagnetische Wellen .....  | 160 |
| 8.2.3 | Normalmoden-Entwicklung .....  | 162 |
| 8.3   | Quantisierung der Normalschwingungen .....   | 163 |
| 8.3.1 | Quantisierung der Entwicklungskoeffizienten $q_w$ und $p_w$ ..                       | 163 |
| 8.3.2 | Besetzungszahl-Darstellung .....   | 164 |
| 8.4   | Feld-Quantisierung .....   | 165 |
| 8.4.1 | Kanonische Feld-Quantisierung .....  | 165 |
| 8.4.2 | Zweite Quantisierung für Bosonen .....   | 166 |
| 8.4.3 | Zweite Quantisierung für Fermionen .....   | 168 |
| 8.4.4 | Quantisierung der Elektromagnetischen Wellen:<br>Photonen .....                      | 170 |

|          |  |            |
|----------|--|------------|
| 8.5      | Beispiel: Elektron-Elektron-Wechselwirkung in Festkörpern . . .  | 172        |
| 8.5.1    | Coulomb-Wechselwirkung. Hartree-Fock-Ansatz . . . . .  | 172        |
| 8.5.2    | Zweite Quantisierung. Austausch-Wechselwirkung . . . . .   | 174        |
| 8.5.3    | Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung<br>auf die Energiebänder in Metallen . . . . .   | 176        |
| 8.5.4    | Einfluss der Korrelationen: Hubbard-Modell * . . . . .   | 178        |
| 8.5.5    | Elektron-Loch-Wechselwirkung in Molekülkristallen:<br>Frenkel-Excitonen . . . . .  | 180        |
| 8.5.6    | Elektron-Elektron(Loch)-Wechselwirkungen<br>in Halbleitern * . . . . .   | 181        |
| 8.5.7    | Wannier-Mott-Excitonen * . . . . .   | 183        |
| 8.6      | Beispiel: Optische Effekte durch Hybrid-Wechselwirkung<br>in hochangeregten Halbleitern * . . . . .                        | 186        |
| 8.6.1    | 3-Band-Hamiltonian mit Hybrid-Wechselwirkung . . . . .   | 186        |
| 8.6.2    | 3-Band-Halbleiter-Bloch-Gleichungen . . . . .  | 190        |
| 8.6.3    | Explizite RWA-Lösung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen  | 191        |
| 8.6.4    | Qualitative Effekte der Hybrid-Wechselwirkung . . . . .  | 193        |
| 8.7      | Beispiel: Elektron-Phonon-Wechselwirkung. Diagramm-Technik   | 195        |
| 8.7.1    | Bloch-Elektronen und Phononen als Idealisierungen . . . . .  | 196        |
| 8.7.2    | Elektron-Kern-Wechselwirkung<br>in Born-Oppenheimer-Näherung . . . . .   | 196        |
| 8.7.3    | Deformationspotenzial-Wechselwirkung * . . . . .   | 198        |
| 8.7.4    | Diagrammtechniken zur Behandlung<br>von Wechselwirkungen: Feynman-Graphen . . . . .  | 201        |
| 8.8      | Beispiel: Elektron-Photon-Wechselwirkung. Polaritonen . . . . .  | 203        |
| 8.8.1    | Maxwell-Lorentz-Theorie . . . . .  | 203        |
| 8.8.2    | Erste Quantisierung . . . . .  | 205        |
| 8.8.3    | Aharonov-Bohm-Effekt * . . . . .   | 206        |
| 8.8.4    | Zweite Quantisierung . . . . .   | 207        |
| 8.8.5    | Gekoppelte verschiedenartige quantenmechanische<br>Pendel: Das excitonische Polariton . . . . .                            | 208        |
| <b>9</b> | <b>Ausblicke</b> . . . . .   | <b>211</b> |
| 9.1      | Zusammenfassung unserer Begründung der Wellenmechanik<br>aus der Klassischen Mechanik und ergänzende Bemerkungen . . . . . | 211        |
| 9.1.1    | Gegenstandsbestimmung – Lösung der<br>Schrödingerschen Probleme . . . . .  | 211        |
| 9.1.2    | Undurchdringlichkeit – Tunneleffekt . . . . .  | 212        |
| 9.1.3    | Zustand <i>versus</i> Bewegung . . . . .   | 213        |
| 9.1.4    | Innere und äußere Parameter . . . . .  | 214        |
| 9.1.5    | Symmetrie . . . . .  | 215        |
| 9.1.6    | Kausalität und Determinismus . . . . .   | 215        |
| 9.1.7    | Verborgene Parameter . . . . .   | 216        |

|                            |   |            |
|----------------------------|---|------------|
| 9.2                        | Offene Fragen – Anregungen .....                        | 217        |
| 9.2.1                      | Kraft und Bahn – Bohrsche Mechanik .....                | 217        |
| 9.2.2                      | Zur Definition der Zeit .....                           | 219        |
| 9.2.3                      | Interner Parameter einer Welle und Feldquantisierung .. | 219        |
| 9.2.4                      | Zur Bedeutung der Potentiale .....                      | 220        |
| 9.2.5                      | Quantisierung im Phasenraum der Potentiale .....        | 220        |
| 9.2.6                      | Vielteilchen-Fragen .....                               | 221        |
| 9.2.7                      | Schlussbemerkungen .....                                | 222        |
| <b>Bibliographie</b>       | .....   | <b>223</b> |
| <b>Personenverzeichnis</b> | .....   | <b>251</b> |
| <b>Sachverzeichnis</b>     | .....   | <b>257</b> |