Quantentheorie I

5.12.2023

Photonen und Wärmestrahlung

Plancksches Wirkungsquantum	$h = 6{,}626 \cdot 10^{-34} Js$ Reduz. Wirkgsquantum: $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ Energie: $E_{photon} = hf = \hbar\omega = pc$ Impuls: $p = \frac{E}{c} = \frac{hf}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$ $[h] = [Wirkung] = [Energie \cdot Zeit] = [Impuls \cdot Länge] = [\int L\, dt]$; L… Lagrange-Funktion
Spektrale Energiedichte	$\varepsilon(\omega) = \frac{dE}{dV\, d\omega} = \langle E\rangle\, \mathrm{n}(\omega)$ Modendichte : $\mathrm{n}(\omega) = \frac{1}{V}\frac{d\,\mathrm{N}(\omega)}{d\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$; $\mathrm{n}(f) = \frac{8\pi f}{c^3}$ … Dichte alle Moden $\leq \omega$ bzw. $\leq f$
Rayleigh-Jeans (nur für kleine Frequenzen):	Bolzmannverteilung Wahrsch.dichte: $\mathrm{p}(E;\beta) = \frac{e^{-\beta E}}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta E'}\, dE'}$; $\beta = \frac{1}{k_B T}$ Erwartungswert Energie $\langle E\rangle = \int_0^{\infty} E\, \mathrm{p}(E;\beta)\, dE = k_B T \Rightarrow$ $\varepsilon_{RJ}(\omega) = \langle E\rangle\, \mathrm{n}(\omega) = k_B T \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$ $\varepsilon_{RJ}(f) = k_B T\, \mathrm{n}(f) = k_B T \frac{8\pi f}{c^3}$
Wiensch'es Gesetz f. große ω	$\varepsilon_W(\omega) = A\omega^3 e^{-\rho\omega}$ Aus $\varepsilon_{pl}(\omega \to \infty)$: $A = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}$; $\rho = \frac{\hbar}{k_B T}$ Wiensches versch.ges. $\frac{\omega_{max}}{k_B T} = const$; $\lambda_{max}(T) = \frac{C_W}{T}$; $C_W = 2{,}898\, mm \cdot K$
Planck'sches Strahlungsges.	Bose-Einstein Wahrsch. pro diskreter Energie $\mathrm{P}_n(E_n;\beta) = \frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}}$; $\beta = \frac{1}{k_B T}$; $E_n = \hbar\omega n$ Erwartungs wert Energie $\langle E\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{E}_n \mathrm{P}_n = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1} \Rightarrow$ $\varepsilon_{pl}(\omega) = \langle E\rangle\, \mathrm{n}(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\frac{1}{e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1}$
Verschränkung	$\lvert\Psi\rangle = \alpha_1\lvert 11\rangle + \alpha_2\lvert 10\rangle + \alpha_3\lvert 01\rangle + \alpha_4\lvert 00\rangle = \alpha_1\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix} + \alpha_2\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix} + \alpha_3\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix} + \alpha_4\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\alpha_1 & \alpha_2\\ \alpha_3 & \alpha_4\end{pmatrix}$ Wenn det $\left(\begin{pmatrix}\alpha_1 & \alpha_2\\ \alpha_3 & \alpha_4\end{pmatrix}\right) = \alpha_1\alpha_4 - \alpha_2\alpha_3 \neq 0 \Rightarrow$ vollst. bestimmt; verschränkt. Wenn $\alpha_1\alpha_4 - \alpha_2\alpha_3 = 0 \Rightarrow$ nicht verschränkt

Materiewellen

De-Broglie, klassisch	$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{mmv^2}} = \frac{h}{\sqrt{2m\frac{1}{2}mv^2}} = \boxed{\frac{h}{\sqrt{2mE_{kin}}}}$ $p = \hbar k$ $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ $v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{E_k}{\hbar k} = \frac{p^2}{2m\hbar k} = \boxed{\frac{\hbar k}{2m}}$; $v_G = \frac{d\omega}{dk} = \boxed{\frac{\hbar k}{m}}$ $E_K = \frac{p^2}{2m}$
relativistisch	$\hbar\omega = E = mc^2 = \gamma m_0 c^2$ $\hbar k = \frac{h}{\lambda} = p = mv = \gamma m_0 v$ $\lambda = \frac{h}{p}$; $v = c\sqrt{1 - \left(\frac{E_0}{E_0 + E_{kin}}\right)^2}$ $p = \frac{1}{c}\sqrt{2E_0 E_{kin} + E_{kin}^2}$

Schrödingergleichung

Allgemein (1D):	$\hat{E}\,\Psi(x,t) = \hat{H}\,\Psi(x,t)\ \Big\vert\ \hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, *weil:* $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}Ae^{i(kx-\omega t)} = \hbar\omega\Psi = E\Psi$ $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \hat{H}\,\Psi(x,t)\ \Big\vert\ \hat{H} = \hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, *weil:* $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}Ae^{i(kx-\omega t)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\Psi = \frac{p^2}{2m}\Psi = \frac{m^2 v^2}{2m}\Psi = \frac{mv^2}{2}\Psi = E_{kin}\Psi \Rightarrow$
Freies Teilchen	$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)}$ mit Potential: $\hat{H} = \hat{E}_{kin} + \hat{E}_{pot} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mathrm{V}(x) \Rightarrow$
Teilch. im Pot.	$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mathrm{V}(x)\right)\Psi(x,t)}$ im konservativen System: $E = const. \Rightarrow \Psi(x,t) = \phi(x)\, e^{-i\omega t} \Rightarrow$
stationär	$\boxed{E\,\phi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mathrm{V}(x)\right)\phi(x)}$; $\Psi(x,t) = \phi(x)\, e^{-i\omega t}$
3D-Gleichung	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \mathrm{V}(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \mathrm{V}(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r},t)$
N Teilchen	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\dots,\vec{r}_n,t) = \left[\sum_{i=1}^{N}\left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta}_{E_{kin}} + \underbrace{\mathrm{V}_1(\vec{r}_i)}_{E_{pot}^{ext}}\right) + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{i,j,i\neq j}^{N}\mathrm{V}_2(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}_{E_{pot}\,Teilchen-WW}\right]\Psi(\vec{r},t)$
Anschlussbedingungen	Potentialstufe bei x_0: (1) $\phi(x_0^-) = \phi(x_0^+)$; (2) $\phi'(x_0^-) = \phi'(x_0^+)$ Delta-Potential $V_0\,\delta(x - x_0)$: (1) $\phi(x_0^-) = \phi(x_0) = \phi(x_0^+)$; (wenn $V_0 < 0$: „attraktives Delta-Potential") (2) $\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} E\,\phi(x)\,dx = \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0\,\delta(x - x_0)\right)\phi(x)\,dx \Rightarrow \phi'(x_0^+) - \phi'(x_0^-) = \frac{2m}{\hbar^2}V_0\,\phi(x_0)$
Eigenschaften	• SG ist partielle DGL • SG ist linear in Ψ, d.h. Ψ kommt nur in erster Potenz vor $\Longrightarrow$ Superpositionsprinzip anwendbar. Beliebige Linearkombinationen von Lösungen der SG sind wieder Lösungen der SG. • SG ist eine homogene DGL, d.h. es ist kein Term vorhanden, der nicht mit Ψ behaftet wäre • Keine Aussage über die Amplitude. Normierung notwendig. • allg. SG ist parabolische partielle DGL, d.h. $\mathrm{B}^2 - 4AC = 0$ für DGL $A\Psi_{xx} + B\Psi_{xt} + CA\Psi_{tt} + DA\Psi_x + E\Psi_t + F\Psi = 0$ • stationäre SG ist elliptische partielle DGL, dh. $\mathrm{B}^2 - 4AC < 0$

Gaußsches Wellenpaket

Ansatz	$\Psi(x,t) = A\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(kx-\omega t)} e^{-(k-k_0)^2 d^2}\, dk\ \Big\vert\ \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \Rightarrow \Psi(x,t) = A\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} e^{-(k-k_0)^2 d^2}\, dk$
Lösung	$\Psi(x,t) = \frac{A}{\sqrt{i\frac{\hbar}{m}t + 2d^2}}\, e^{-k_0^2 d^2 + \frac{\left(i\frac{x}{2} + k_0 d^2\right)^2}{i\frac{\hbar}{2m}t + d^2}}$; $\lvert\Psi(x,t)\rvert^2 = \frac{A^2}{\sqrt{2\pi d^2(1+\Delta^2)}}\, e^{-\frac{(x - v_0 t)^2}{2d^2 d^2(1+\Delta^2)}}$; $v_0 = \frac{\hbar k_0}{m}$; $\Delta = \frac{\hbar t}{2md^2}$
Eigenschaften	$\langle x\rangle_t = \langle\phi\lvert x\rvert\phi\rangle = v_0 t$; $\langle p\rangle_t = \langle\phi\lvert p\rvert\phi\rangle = \hbar k_0 = p_0 = mv_0 = const.$; $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}\frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar k}{m} = v_g(k)$; $v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{1}{k}\frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{v_{ph}(k)}{2} < v_{ph}(k)$

Korrespondenz-Identitäten (Operatoren), Erwartungswerte und Eigenfunktionen

	Sei A irgendeine mit Quantenunschärfe behaftete quantenphysikalische Messgröße („*Observable*"), z.B. Ort oder Impuls.
Erwartungswert	$\langle A\rangle = \frac{1}{n}\sum_{n=1}^{n} A_i$ (Der Erwartungswert <A> ist der zu erwartende Mittelwert bei wiederholter Messung.)
Operatoren $\hat{A}$	$\langle A\rangle = \langle\Psi\vert\hat{A}\vert\Psi\rangle = \int_{Bereich} \Psi^* \hat{A}\, \Psi\, d\tau$ ($\hat{A}$... Operator von A)

Korrespondenz-

Observable	Operator 1-dimensional	Operator 3-dimensional
Ortsvektor $\vec{r}$ bzw. Koordinate x	$\hat{x} = x$	$\hat{\vec{r}} = \vec{r}$
Potentielle Energie E_{pot}	$\hat{E}_{pot} = E_{pot}(x) = \hat{\mathbb{V}}(x)$	$\hat{E}_{pot} = E_{pot}(\vec{r}) = \hat{\mathbb{V}}(\vec{r})$
kinetische Energie E_{kin}	$\hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$	$\hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$
Gesamtenergie $E = E_{kin} + E_{pot}$	$\hat{H} = \hat{V} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ (Hamilton-Operator 1D)	$\hat{H} = \hat{V} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ (Hamilton-Operator 3D)
Impuls p bzw. $\vec{p}$	$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$	$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$
Drehimpuls $\vec{L}$	z-Komponente von $\vec{L}$: $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$	$\hat{\vec{L}} = -i\hbar(\hat{\vec{r}}\times\vec{\nabla}) = -i\hbar\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \vec{e}_\vartheta\frac{1}{\sin(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$
Drehimpulsquadrat $\vec{L}^2$	$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2(\vartheta)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$	

Mittlere quadr. Schwankung	$\langle A^2\rangle = \frac{1}{n}\sum_{n=1}^{n}(A_i - \langle A\rangle) = \hat{A}^2\Psi = \int\Psi^*\hat{A}^2\,\Psi\,d\tau$	Unschärfe:	$\Delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}$
Wahrscheinlich keitsdichte:	$d\,\mathrm{P}(x,t) = \rho(x,t) = \vert\vert\Psi(x,t)\rangle\vert^2 = \Psi(x,t)\,\Psi^*(x,t)$	Wahrsch. dass Teilch in (a,b):	$\mathrm{P}(x,t) = \langle\Psi^*\vert\Psi\rangle$; $\int_a^b \vert\vert\Psi\rangle\vert^2\,dx$; $\int_{-\infty}^{+\infty}\vert\vert\Psi\rangle\vert^2\,dx = 1$
Eigenfunktion, Eigenwert	Wenn gilt: $\hat{A}\Psi = A\Psi \Leftrightarrow \int\Psi^*\hat{A}\,\Psi\,d\tau = A\int\Psi^*\,\Psi\,d\tau$, dann ist $\hat{A}$ eine Eigenfunktion und A ein Eigenwert. Es gilt: $\langle A\rangle = A$; $\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 = 0$; d.h. die mittlere quadr. Schwankung von A=0, man misst immer denselben Wert von A. Haben Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ zu den Größen A und B dieselbe Eigenfunktion ϕ, dann lassen sich die Größen A und B am Teilchen mit der Wellenfunktion Ψ <u>gleichzeitig scharf messen</u>. Die Operatoren sind vertauschbar. Es gilt: $\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi$.		

Fourier-Transformationen

Hier: Konvention Faktor $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ bei Hin- und Rücktrafo. Etwas schlüssiger bei δ-Funktion wäre Faktor 1 bei Hin- und $\frac{1}{2\pi}$ bei Rücktransformation.			
k-Raum, stationär, 1D	$\tilde{\phi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(x)\,e^{-ikx}\,dx$	Rücktrafo:	$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\phi}(k)\,e^{+ikx}\,dk$
k^3-Raum, stationär, 3D	$\tilde{\phi}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\iiint_{\mathbb{R}^3}\phi(\vec{r})\,e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\,d\vec{r}$	Rücktrafo:	$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\iiint_{k^3}\tilde{\phi}(\vec{k})\,e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}}\,d\vec{k}$
k,ω-Raum, zeitabh., 1D	$\tilde{\Psi}(k,\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t)\,e^{-i(kx-\omega t)}\,dx\,dt$	Rücktrafo:	$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\Psi}(k,\omega)\,e^{+i(kx-\omega t)}\,dk\,d\omega$
k^3,ω-Raum, zeitabh., 3D	$\tilde{\Psi}(\vec{k},\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\int_{-\infty}^{\infty}\iiint_{\mathbb{R}^3}\Psi(\vec{r},t)\,e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\,d\vec{r}\,dt$	Rücktrafo:	$\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\int_{-\infty}^{\infty}\iiint_{k^3}\tilde{\Psi}(\vec{k},\omega)\,e^{+i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\,d\vec{k}\,d\omega$
p-Raum, stationär, 1D	$\tilde{\phi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(x)\,e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\,dx$	Rücktrafo:	$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\phi}(p)\,e^{+i\frac{p}{\hbar}x}\,dp$
δ-Funktion 1D	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x_0)\,e^{-ik(x-x_0)}\,dx$	Rücktrafo:	$\delta(x-x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{+ik(x-x_0)}\,dk$
schlüssiger mit $1/\frac{1}{2\pi}$-Konvent.	$1 = \int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x_0)\,e^{-ik(x-x_0)}\,dx$	Rücktrafo:	$\delta(x-x_0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}1\cdot e^{+ik(x-x_0)}\,dk$

Transfer- und Streumatrix; Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Geg.: Potentialstufe; links Bereich I, rechts Bereich II. Wellenfkt. zweigeteilt: $\phi_I(x) = Ae^{\lambda_I k_1 x} + Be^{-\lambda_I k_1 x}$; $\phi_{II}(x) = Ce^{\lambda_{II} k_2 x} + De^{-\lambda_{II} k_2 x}$		
flussnorm.	$\phi_I(x) = \tilde{A}\sqrt{\frac{1}{k_1}}e^{\lambda_I k_1 x} + \tilde{B}\sqrt{\frac{1}{k_1}}e^{-\lambda_I k_1 x}$; $\phi_{II}(x) = \tilde{C}\sqrt{\frac{1}{k_2}}e^{\lambda_{II} k_2 x} + \tilde{D}\sqrt{\frac{1}{k_2}}e^{-\lambda_{II} k_2 x} \Rightarrow A = \tilde{A}\sqrt{\frac{1}{k_1}}; B = \tilde{B}\sqrt{\frac{1}{k_1}}; C = \tilde{C}\sqrt{\frac{1}{k_2}}; D = \tilde{D}\sqrt{\frac{1}{k_2}}$	
Transfer-matrix:	$\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix} = \underline{\underline{M}}\begin{pmatrix}C\\D\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}M_{11} & M_{12}\\M_{21} & M_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C\\D\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{matrix}A = M_{11}C + M_{12}D\\B = M_{21}C + M_{22}D\end{matrix} \Rightarrow \text{löse}\begin{matrix}A = \mathrm{A}(C,D) = CM_{11} + DM_{12}\\B = \mathrm{B}(C,D) = CM_{21} + DM_{22}\end{matrix}$	
Streu-matrix (unitär):	$\underbrace{\begin{pmatrix}B\\C\end{pmatrix}}_{\psi_{out}} = \underline{\underline{S}}\underbrace{\begin{pmatrix}A\\D\end{pmatrix}}_{\psi_{in}} = \begin{pmatrix}S_{11} & S_{12}\\S_{21} & S_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A\\D\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{matrix}B = S_{11}A + S_{12}D\\C = S_{21}A + S_{22}D\end{matrix} \Rightarrow \underline{\underline{S}} = \begin{pmatrix}\frac{M_{21}}{M_{11}} & M_{22} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{11}}\\\frac{1}{M_{11}} & -\frac{M_{12}}{M_{11}}\end{pmatrix}; \underline{\underline{\tilde{S}}} = \begin{pmatrix}S_{11} & S_{12}\sqrt{\frac{k_1}{k_2}}\\S_{21}\sqrt{\frac{k_2}{k_1}} & S_{22}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\sqrt{R} & \sqrt{T'}\\\sqrt{T} & \sqrt{R'}\end{pmatrix}$	
Wahrscheinl stromdichte	$\mathrm{j}[\Psi] = \mathrm{Re}\left(\Psi^*\frac{1}{m}\hat{p}\Psi\right) = \mathrm{Re}\left(\Psi^*\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi\right)$; $j_{in} = \mathrm{j}[Ae^{\lambda_I kx}]$; $j_{refl} = \mathrm{j}[\mathrm{B}(A)\,e^{-\lambda_I kx}]$; $j_{out} = \mathrm{j}[Ce^{\lambda_{II}k'x}]$ $j_I = \mathrm{j}[Ae^{\lambda_I kx} + Be^{-\lambda_I kx}] = \frac{\hbar k_1}{m}(\vert A\vert^2 - \vert B\vert^2)$; $j_{II} = \mathrm{j}[Ce^{\lambda_{II}k'x} + De^{-\lambda_{II}k'x}] = \frac{\hbar k_2}{m}(\vert C\vert^2 - \vert D\vert^2)$	Kontinuitätsbedingung $\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x} \Longrightarrow j = \rho v$
T, R	$T_{li} = \left\vert\frac{j_{out}}{j_{in}}\right\vert = \frac{\vert\tilde{C}\vert^2}{\vert\tilde{A}\vert^2} = \frac{\vert C\vert^2}{\vert A\vert^2}\frac{k_2}{k_1} = \frac{1}{\vert M_{11}\vert^2}\frac{k_2}{k_1} = \vert S_{21}\vert^2\frac{k_2}{k_1}$ $R_{li} = \left\vert\frac{j_{refl}}{j_{in}}\right\vert = \frac{\vert\tilde{B}\vert^2}{\vert\tilde{A}\vert^2} = \frac{\vert B\vert^2}{\vert A\vert^2} = \vert S_{11}\vert^2 = \left\vert\frac{M_{21}}{M_{11}}\right\vert^2$	$k_1(\vert A\vert^2 - \vert B\vert^2) = k_2(\vert C\vert^2 - \vert D\vert^2)$
Verschiebg. Stufe/δ um L	Sei $\underline{\underline{M}}_0$ die Transfermatrix bei $x = 0$, dann ist $\underline{\underline{M}}_L = \underline{\underline{M}}_{-L}^{k_1}\underline{\underline{M}}_0\underline{\underline{M}}_L^{k_2}$; $mit\ \underline{\underline{M}}_L^{k_2} = \begin{pmatrix}e^{ikL} & 0\\0 & e^{-ikL}\end{pmatrix}$	

BraKet-Notation

Bra-Vektor:	$\langle\psi\| \in \mathcal{H}^*$ Ket-Vektor: $\|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ → darstellungsfrei, d.h. keiner Basis zugeordnet! $\langle\psi\| = \|\psi\rangle^\dagger;\ \|\psi\rangle = \langle\psi\|^\dagger$
Eigenschaften von Vektoren in $\mathcal{H}$	$\mathcal{H}$ ist ein ∞-dimensionaler Hilbertraum isomorph zu $\mathbb{C}^\infty$ (∞-dimensional: es gibt unendlich viele LU Zustandsvektoren) Für $\|\psi_1\rangle, \|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ gilt: V1: $\|\psi_1\rangle + (\|\psi_2\rangle + \|\psi_3\rangle) = (\|\psi_1\rangle + \|\psi_2\rangle) + \|\psi_3\rangle$ (Assoziativgesetz) V2: $\exists 0 \in V: \|\psi\rangle + 0 = 0 + \|\psi\rangle\ \forall\|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (neutrales Element 0) V3: $\|\psi\rangle + (-\|\psi\rangle) = 0$ (inverses Element) V4: $\|\psi_1\rangle + \|\psi_2\rangle = \|\psi_2\rangle + \|\psi_1\rangle$ (Kommutativgesetz) Für $\|\psi_1\rangle, \|\psi_2\rangle, \|\psi_3\rangle \in \mathcal{H}$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ gilt: S1: $\alpha(\|\psi_1\rangle + \|\psi_2\rangle) = \alpha\|\psi_1\rangle + \alpha\|\psi_2\rangle$ S2: $(\alpha + \beta)\|\psi_1\rangle = \alpha\|\psi_1\rangle + \beta\|\psi_2\rangle$ S3: $\alpha(\beta\|\psi_1\rangle) = (\alpha\beta)\|\psi_1\rangle$ S4: $1 \cdot \|\psi_1\rangle = \|\psi_1\rangle$ (neutrales Element 1)
Skalarprodukt → komplexe Zahl	Sesquilinear: $\langle\psi_1\|\alpha\psi_2 + \beta\psi_3\rangle = \alpha\langle\psi_1\|\psi_2\rangle + \beta\langle\psi_1\|\psi_3\rangle$ (Linearität im ersten Argument des Skalarprodukts) $\langle\alpha\psi_1 + \beta\psi_2\|\psi_3\rangle = \alpha^*\langle\psi_1\|\psi_3\rangle + \beta^*\langle\psi_2\|\psi_3\rangle$ (Semilinearität im zweiten Argument des Skalarprodukts) $\langle\psi_1\|\psi_2\rangle = \langle\psi_2\|\psi_1\rangle^*$ $\langle\psi_1\|\psi_1\rangle \geq 0\ \forall\|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}$ $\langle\psi_1\|\psi_1\rangle = 0 \iff \|\psi_1\rangle = 0$ Schwarz'sche Ungleichung: $\|\langle\psi_1\|\psi_2\rangle\|^2 \leq \langle\psi_1\|\psi_1\rangle \cdot \langle\psi_2\|\psi_2\rangle$ Norm: $\\|\psi_1\\| = \sqrt{\langle\psi_1\|\psi_1\rangle}$
Regeln	$\alpha\ \|\psi_1\rangle + \beta\ \|\psi_2\rangle \triangleq \alpha^*\langle\psi_1\| + \beta^*\langle\psi_2\|$; $\alpha\ \|\psi\rangle = \|\alpha\psi\rangle \triangleq \langle\psi\|\alpha^* = \langle\alpha\psi\|$
Operatoren	Entstehen aus äußerem (Tensor)produkt: $\hat{A} = \|\varphi\rangle\langle\psi\| = (\|\psi\rangle\langle\varphi\|)^\dagger$; $\hat{A}\|\psi\rangle = \|\hat{A}\psi\rangle \rightarrow \langle\hat{A}\psi\| = \langle\psi\|\hat{A}^\dagger$ $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \rightarrow \hat{A}\hat{B}\|\psi\rangle = \langle\psi\|(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \langle\psi\|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$; $(\alpha\hat{A})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger$; $\langle\varphi\|\hat{A}\|\psi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\varphi\|\psi\rangle = \langle\varphi\|\hat{A}\psi\rangle$ $\langle\varphi\|\hat{A}\|\psi\rangle^* = \langle\psi\|\hat{A}^\dagger\|\varphi\rangle$; Projektionsoperator: $\hat{P}_{\{u\}} = \|u\rangle\langle u\| \rightarrow \hat{P}_{\{u\}}\|\psi\rangle = \|u\rangle\langle u\|\psi\rangle = \alpha\|\psi\rangle$, analog zu $P_{e_x}\vec{a} = \vec{e}_x(\vec{e}_x \cdot \vec{a})$
Spektraldarst.	$\hat{A} = \sum_i A_i\|a_i\rangle\langle a_i\|$ (mit A_i…EW, $\|a_i\rangle$…EV) ; Vollst. der Basisprojektoren: $\sum_i\|a_i\rangle\langle a_i\| = \mathbb{1}$
Hermitesche Operatoren	$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \iff A^*_{nm} = A_{mn} \Longrightarrow$ EW $\lambda \in \mathbb{R}$; $\langle\psi_1\|(\hat{A}\|\psi_2\rangle)\rangle = \langle(\langle\psi_1\|\hat{A})\|\psi_2\rangle = \langle\psi_1\|\hat{A}\|\psi_2\rangle$ (Klammern unnötig) Messwerte ⇔ EW von Â: $\hat{A}\|\psi\rangle = \lambda\|\psi\rangle \Longrightarrow \langle\psi\|\hat{A}\|\psi\rangle = \lambda\langle\psi\|\psi\rangle \Longrightarrow \lambda = \frac{\langle\psi\|\hat{A}\|\psi\rangle}{\langle\psi\|\psi\rangle}$ wenn: $\langle\psi\|\psi\rangle = 1 \Longrightarrow \lambda = \langle\psi\|\hat{A}\|\psi\rangle$ $\hat{A}\|\psi\rangle = \lambda_2\|\psi_2\rangle \Longrightarrow \langle\psi_1\|\hat{A}\|\psi_2\rangle = \langle\psi_1\|\lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_2\langle\psi_1\|\psi_2\rangle$
Kommutierende Operatoren	Wenn $\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B} \Longrightarrow$ (1) $\hat{A}$ und $\hat{B}$ bilden einen vollst. Satz kommutierender Observablen, (2) besitzen gem. Eigenfkt. (EV), und (3) sind gleichzeitig scharf messbar ($\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = 0$)
Projektion auf OGB (Vektor/Matrix Darstellung)	Eigenbasis von Â: A_i…Eigenwerte, $\|a_i\rangle$…Eigenvektoren (Basis) $\hat{A}\|a_i\rangle = A_i\|a_i\rangle \Longrightarrow \|\psi\rangle = \sum_i \mathrm{P}_i^{\{a\}}\|\psi\rangle = \overbrace{\sum_i\|a_i\rangle\langle a_i}^{\mathbb{1}}\|\psi\rangle = \sum_i \overbrace{\|a_i\rangle}^{Basis}\overbrace{\langle a_i\|\psi\rangle}^{Koeff.} \Longrightarrow$ Ket: $\|\psi\rangle^{\{a\}} = \begin{pmatrix}\langle a_1\|\psi\rangle \\ \langle a_2\|\psi\rangle \\ \dots\end{pmatrix}$; Bra: $\langle\psi\|^{\{a\}} = (\langle a_1\|\psi\rangle^*, \langle a_2\|\psi\rangle^*, \dots)$; Operator: $\hat{A}_{ij}^{\{a\}} = \langle a_i\|\hat{A}\|a_j\rangle$
Basiswechsel von Basis $\{\|a_1\rangle, \|a_2\rangle, \dots\}$ zu Basis $\{\|b_1\rangle, \|b_2\rangle, \dots\}$	$\|b_i\rangle = \hat{U}\|a_i\rangle\| \cdot \langle a_i\| \Rightarrow \|b_i\rangle\langle a_i\| = \hat{U}\|a_i\rangle\langle a_i\|\|\sum \Rightarrow \sum\|b_i\rangle\langle a_i\| = \hat{U}\sum\|a_i\rangle\langle a_i\| \Rightarrow \hat{U} = \sum_i\|b_i\rangle\langle a_i\| = \begin{pmatrix} \| & \| & \| \\ \|b_1\rangle^{\{a\}} & \|b_2\rangle^{\{a\}} & \dots \\ \| & \| & \| \end{pmatrix}$ Trafo Basisvektoren: $\|b_i\rangle = \hat{U}\|a_i\rangle$; Trafo Vektoren: $\|\psi\rangle^{\{b\}} = \hat{U}^{-1}\|\psi\rangle^{\{a\}} = \hat{U}^\dagger\|\psi\rangle^{\{a\}}$; Trafo Operatoren: $\hat{A}^{\{b\}} = \hat{U}^\dagger\hat{A}^{\{a\}}\hat{U}$
Wahrscheinlichkeit, Erwartungswert	Operator $\hat{A}$ („Observable") mit EW $A_1 \dots A_n$ (entspr. „Messwerten") und EV $\|a_1\rangle, \|a_2\rangle, \dots, \|a_n\rangle$; $\hat{A}$ wirkt auf Zust. $\|\psi\rangle$ („Messung") ⇒ $\hat{A}\|\psi\rangle$ ⇒ dann ist die <u>Wahrscheinlichkeit W_i des Auftretens von EW (Messwert) A_i:</u> $W_i = \langle\hat{P}_i\rangle = \langle\psi\|\hat{\mathrm{P}}_i\|\psi\rangle = \langle\psi\|a_i\rangle\langle a_i\|\psi\rangle = \langle a_i\|\psi\rangle^*\langle a_i\|\psi\rangle = \|\langle a_i\|\psi\rangle\|^2$. Erwartungswert: $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi\|\hat{A}\|\psi\rangle = \sum_n W_i A_i$ Wahrscheinlichkeit W_0, das System in Zustand ψ_0 zu finden: $W_0 = \langle\hat{P}_0\rangle = \langle\psi\|\hat{\mathrm{P}}_0\|\psi\rangle = \langle\psi\|\psi_0\rangle\langle\psi_0\|\psi\rangle = \|\langle\psi_0\|\psi\rangle\|^2$
Erweiterter Hilbertr. mit Diracvektoren	bisher: abzählbare Basis $\{\varphi_1(x), \varphi_2(x) \dots\}$: $\langle\varphi_n\|\varphi_m\rangle = \delta_{nm}$ jetzt: kontinuierliche Basis $\varphi_k(x)\ k \in \mathbb{R}$: $\langle\varphi_k\|\varphi_{k'}\rangle = \delta(k' - k)$
Projektion auf VONS $\varphi_k(x)\ k \in \mathbb{R}$	bisher: abzählbare Basis $\{\varphi_1(x), \varphi_2(x) \dots\}$: $\overbrace{\|\psi\rangle}^{abstrakt} = \sum_k \overbrace{\|\varphi_i\rangle}^{Basis}\overbrace{\langle\varphi_i\|\psi\rangle}^{Koeff.};\ \overbrace{\psi(x)}^{konkret} = \sum_i \overbrace{\langle x\|\varphi_i\rangle}^{Basis\ \varphi_i(x)}\overbrace{\langle\varphi_i\|\psi\rangle}^{Koeff\ c(i)=c_i} = \sum_k \varphi_i(x)\, c_i$ jetzt: kontinuierliche Basis $\varphi_i(x), i \in \mathbb{R}$: $\overbrace{\|\psi\rangle}^{abstrakt} = \int_{-\infty}^{\infty} \overbrace{\|\varphi_i\rangle}^{Basis}\overbrace{\langle\varphi_i\|\psi\rangle}^{Koeff.}\, di;\ \overbrace{\psi(x)}^{konkret} = \int_{-\infty}^{\infty} \overbrace{\langle x\|\varphi_i\rangle}^{Basis\ \varphi_i(x)}\overbrace{\langle\varphi_i\|\psi\rangle}^{Koeff\ \psi(i)}\, di = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i(x)\,\psi(i)\, di$
z.B. Eigenfkt. d. Ortsoperators	$\psi(x) = \|\psi_x\rangle = \langle x\|\psi\rangle = \langle x\|\hat{\mathbb{1}}\|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x\|x'\rangle\langle x'\|\psi\rangle\, dx' = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x\|x'\rangle\langle x'\|\psi\rangle\, dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \boxed{\delta(x - x')}\,\psi(x')\, dx' = \psi(x)$ $\psi(x) = \|\psi_x\rangle = \langle x\|\psi\rangle = \langle x\|\hat{\mathbb{1}}\|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x\|p\rangle\langle p\|\psi\rangle\, dp = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x\|p\rangle\langle p\|\psi\rangle\, dp = \int_{-\infty}^{\infty} \boxed{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}}\,\psi(p)\, dp = \psi(x)$
Umformungen:	$\langle x\|\psi\rangle = \psi(x);\ \langle p\|\psi\rangle = \psi(p);\ \langle x\|\hat{x}\|\psi\rangle = (\hat{x}\psi)(x);\ \langle x\|\hat{p}\|\psi\rangle = (\hat{p}\psi)(x);\ allg{:}\ \langle i\|\hat{A}\|\psi\rangle = (\hat{A}\psi)(i)$ $\langle x\|x'\rangle = \varphi_x(x) = \delta(x - x');\ \langle x\|p\rangle = \varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{+i\frac{p}{\hbar}x};\ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')}\, dp = \delta(x - x');$ $\langle p\|p'\rangle = \varphi_p(p) = \delta(p - p');\ \langle p\|x\rangle = \varphi_x(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{p}{\hbar}x};\ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i\frac{p-p'}{\hbar}x}\, dx = \delta(p - p');$

Zeitentwicklung

Rezept 1:	(1) Geg.: Wellenfunktion $\Psi(\mathrm{t}=0)$, ausgedrückt in Basis B, so dass $\Psi(0)=\sum_i \beta_i \lvert b_i\rangle$. (2) Berechne die Eigenenergiebasis, also Eigenwerte (Eigenenergien) E_n und Eigenvektoren $\lvert E_n\rangle$ des Hamiltonoperators $\hat{H}$. (3) Transformiere $\Psi(0)$ in die Eigenenergiebasis (z.B. mit $\lvert\psi\rangle^{\{H\}}=\hat{U}^\dagger \lvert\psi\rangle^{\{B\}}$), so dass $\Psi(0)=\sum_i \gamma_i \lvert E_i\rangle$. (4) $\Psi(\mathrm{t})=\sum_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\gamma_n \lvert E_n\rangle$
Rezept 2:	(1) Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}=e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$. (2) Berechne die Eigenenergiebasis, E_n und $\lvert E_n\rangle$ des Hamiltonoperators $\hat{H}$. (3) Spektralzerlegung $\hat{U}=\sum_n \lvert E_n\rangle\langle E_n\rvert e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ (4) $\Psi(\mathrm{t})=\hat{U}\,\Psi(0)$

Harmonischer Oszillator 1D

Potential, Hamilton	$V=\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \Longrightarrow \hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$	Eigen-zust.:	$\langle x\vert n\rangle=\mathrm{u}_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\mathrm{H}_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right);E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$
Reduz. Koord.:	$x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}};p_0=\sqrt{m\hbar\omega};\ y=\frac{x}{x_0};\ \varepsilon_n=\frac{E_n}{\hbar\omega};V=\frac{1}{2}\hbar\omega y^2 \Longrightarrow \hat{H}_y=-\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}y^2;\mathrm{u}_n(x)=\frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}2^n n!}}e^{-\frac{1}{2}y^2}\mathrm{H}_n(y);\varepsilon_n=n+\frac{1}{2}$		
Aufsteiger	$\hat{a}^\dagger=\frac{x}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}-\frac{x}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{x}{x_0}-\frac{x_0}{\sqrt{2}}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{1}{\sqrt{2}}y-\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\partial}{\partial y}$	$\hat{a}^\dagger\lvert\mathrm{u}_n\rangle=\sqrt{n+1}\lvert\mathrm{u}_{n+1}\rangle$	$\hat{a}\neq\hat{a}^\dagger \Longrightarrow$ nicht hermitesch $[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=\mathbb{1}\Longrightarrow \hat{a}\hat{a}^\dagger=1+\hat{a}^\dagger\hat{a}\Longrightarrow$
Absteiger	$\hat{a}=\frac{x}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}+\frac{x}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{x}{x_0}+\frac{x_0}{\sqrt{2}}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{1}{\sqrt{2}}y+\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\partial}{\partial y}$	$\hat{a}\lvert\mathrm{u}_n\rangle=\sqrt{n}\lvert\mathrm{u}_{n-1}\rangle;\ \hat{a}\lvert\mathrm{u}_0\rangle=0$	$\langle\psi\vert\hat{a}^\dagger\hat{a}\vert\psi\rangle=\langle\hat{a}\psi\vert\hat{a}\psi\rangle$ $\langle\psi\vert\hat{a}\hat{a}^\dagger\vert\psi\rangle=\langle\psi\vert\psi\rangle+\langle\hat{a}\psi\vert\hat{a}\psi\rangle$
Orts-operator	$\hat{x}=\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)$	$\langle\hat{\mathrm{x}}\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}\langle\psi\vert\hat{a}+\hat{a}^\dagger\vert\psi\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\langle\psi\vert\hat{a}\vert\psi\rangle+\langle\psi\vert\hat{a}^\dagger\vert\psi\rangle)=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\langle\psi\vert\hat{a}\psi\rangle+\langle\hat{a}\psi\vert\psi\rangle)$	
Impuls-operator	$\hat{p}=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{i}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{i}\frac{1}{x_0}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)$	$\langle\hat{\mathrm{p}}\rangle=\frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0}\langle\psi\vert\hat{a}-\hat{a}^\dagger\vert\psi\rangle=\frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0}(\langle\psi\vert\hat{a}\vert\psi\rangle-\langle\psi\vert\hat{a}^\dagger\vert\psi\rangle)=\frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0}(\langle\psi\vert\hat{a}\psi\rangle-\langle\hat{a}\psi\vert\psi\rangle)$	
Besetz.-operator	$\hat{N}=\hat{a}^\dagger\hat{a};\ \hat{N}\lvert\mathrm{u}_n\rangle=n\lvert\mathrm{u}_n\rangle$	Hamilton operator	$\hat{H}=\hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a})=\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\left(\hat{N}+\frac{1}{2}\right)$
Zeitent-wicklung	$\psi(x,t)=\sum_n c_n\,u_n(x)\,e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}=\sum_n c_n\,u_n(x)\,e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t}$		

„Kohärente" Glauberzustände

Glauberzustände $\lvert\varphi_\alpha\rangle$ sind Eigenzust. von $\hat{a}$:	$\hat{a}\lvert\varphi_\alpha\rangle=\alpha\lvert\varphi_\alpha\rangle;\alpha\epsilon\mathbb{C}$	$\alpha(t)=\alpha e^{-i\omega t}=\lvert\alpha\rvert e^{-i\delta}e^{-i\omega t}$	$\langle\varphi_\alpha\vert\varphi_\alpha\rangle=1;\ \langle\varphi_\alpha\vert\varphi_{\alpha'}\rangle\neq\delta(\alpha-\alpha')$
$\lvert\varphi_\alpha(0)\rangle=e^{-\frac{\lvert\alpha\rvert^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}\alpha^n\lvert u_n\rangle;\ \lvert\varphi_\alpha(t)\rangle=e^{-\frac{i\omega t}{2}}e^{-\frac{\lvert\alpha\rvert^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}\alpha^n(t)\lvert u_n\rangle=\frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{\lvert\alpha\rvert^2}{2}}e^{-\frac{-i\omega t}{2}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}e^{\frac{2\alpha(t)x}{\sqrt{2}x_0}}e^{-\frac{\alpha(t)^2}{2}}$			
$\langle x\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}\langle\varphi_\alpha\vert\hat{a}+\hat{a}^\dagger\vert\varphi_\alpha\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\langle\varphi_\alpha\vert\cdot\hat{a}\vert\varphi_\alpha\rangle+\langle\varphi_\alpha\vert\hat{a}^\dagger\cdot\vert\varphi_\alpha\rangle)=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\langle\varphi_\alpha\vert\cdot\alpha\vert\varphi_\alpha\rangle+\langle\varphi_\alpha\vert\alpha^*\cdot\vert\varphi_\alpha\rangle)=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\alpha\langle\varphi_\alpha\vert\varphi_\alpha\rangle+\alpha^*\langle\varphi_\alpha\vert\varphi_\alpha\rangle)=$ $\langle x\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\alpha+\alpha^*)=\frac{x_0}{\sqrt{2}}2\,\mathrm{Re}(\alpha)$; analog: $\langle x^2\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}((\alpha+\alpha^*)^2+1);\ \Delta x^2=\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2=\frac{x_0^2}{2}$ $\langle p\rangle=\frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0}(\alpha-\alpha^*)=\frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0}2\,\mathrm{Im}(\alpha);\ \langle p^2\rangle=\frac{\hbar^2}{2x_0^2}((\alpha-\alpha^*)^2-1);\ \Delta p^2=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2=\frac{\hbar^2}{2x_0^2}\Longrightarrow \Delta\mathrm{p}\Delta\mathrm{x}=\frac{\hbar^2}{2}$			
$\langle\mathrm{x}(t)\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\alpha(t)+\alpha^*(t))=\sqrt{2}x_0\lvert\alpha\rvert\cos(\omega t-\delta);\ \langle\mathrm{p}(t)\rangle=\frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0}(\alpha(t)+\alpha^*(t))=\frac{\hbar}{x_0}\sqrt{2}\sin(\omega t-\delta)$			

Drehimpuls

Operator $\hat{\vec{L}}$:	$\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}=\vec{r}\times\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)=\frac{\hbar}{i}(\vec{r}\times\vec{\nabla})=\varepsilon_{ijk}x_j\frac{\partial}{\partial x_k}$	$\hat{L}_x=\frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right);\ \hat{L}_y=\frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right);\ \hat{L}_z=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$				
Vektoroperator	Ein Operator $\hat{\vec{A}}$ ist nur dann ein Vektoroperator, wenn gilt: $[L_i,A_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}A_k$. $\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}},\hat{\vec{L}}$ sind Vektoroperatoren $\Longrightarrow$					
Kommutatoren:	$[L_i,x_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}x_k;\ \ [L_i,p_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}x_k;\ \ [L_i,L_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$	Operator $\hat{L}^2$:	$\hat{L}^2=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2$			
Kompat. zu L_i:	$\hat{H},\hat{L}^2,\hat{S}^2,\hat{\vec{r}}^2,\hat{\vec{p}}^2$	kompat. zu $\hat{L}^2$:	$\hat{H},L_i,\hat{S}^2,\hat{S}_i,\hat{\vec{r}}^2,\hat{\vec{p}}^2$	Erwartungswerte:	$\langle L_x\rangle=\langle L_y\rangle=0;\ \ \langle L_x^2\rangle=\langle L_y^2\rangle\geq\frac{1}{4}\hbar^2$	
Eigenzustände	$\hat{L}^2\lvert lm_l\rangle=l(l+1)\hbar^2\lvert lm_l\rangle$ $\hat{L}_z\lvert lm_l\rangle=m_l\hbar\lvert lm_l\rangle$	Bahndrehimpulsquantenz. l zu Operator $\hat{L}^2$	$l=0,\dots,n-1$ $l=s,p,d,f,g,\dots$	Magn. Drehimp.-QZ m_l zu Operator $\hat{L}_z$:	$m_l=\frac{L_z}{\hbar}=\{-l,\dots,+l\}$	
Leiteropera-toren	$\hat{L}_\pm=\hat{L}_x\pm iL_y$; nicht hermit.: $\hat{L}_+^\dagger=\hat{L}_-;\ \hat{L}_-^\dagger=\hat{L}_+$	Auf- Absteiger:	$\hat{L}_\pm\lvert lm_l\rangle=\sqrt{(l\mp m_l)(l\pm m_l+1)}\hbar\lvert l,m_l\pm1\rangle$			
	$\hat{L}_x=\frac{1}{2}(\hat{L}_++\hat{L}_-);\ \hat{L}_y=-i\frac{1}{2}(\hat{L}_+-\hat{L}_-);\ \hat{L}^2=\frac{1}{2}(\hat{L}_+\hat{L}_-+\hat{L}_-\hat{L}_+)+\hat{L}_z{}^2$					
Gyromag. Verh	$\gamma=\frac{\lvert\mu\rvert}{\lvert L\rvert}=\frac{\lvert q\rvert}{2m_q}$	Bohrsches Magneton	$\mu_B^{cgs}=\frac{\lvert e\rvert}{2m_e c}\hbar;\ \mu_B^{SI}=\frac{\lvert e\rvert}{2m_e}\hbar$	allgemeines Magneton	$\vec{\mu}_z=\mathrm{sign}(q)\,\mu_B\frac{\vec{L}_z}{\hbar}=\mathrm{sign}(q)\,\mu_B m=$ $\mathrm{sign}(q)\,\gamma\vec{L}$	
Entartung n,l	Entartung = $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$(ohne Spin)					
Eigenzust. allg.	Seien $\hat{A}^2,\hat{A}_z$ irgendwelche Drehimpuls-oder Spinoperatoren. Dann gilt: $\hat{A}^2\lvert\psi\rangle=a(a+1)\hbar^2\lvert\psi\rangle;\ \hat{A}_z\lvert\psi\rangle=m_a\hbar\lvert\psi\rangle$					

Spin

Spinmoment	$\vec{\mu}_s = \text{sign}(q)\,\mu_B g_s \frac{\vec{s}}{\hbar} = \gamma \vec{S}$	Landé-Faktor:	$g_s^e = 2{,}0023 \ldots \approx 2$	Spinquantenzahl:	Quantenzahl s zu Operator $\hat{S}^2$. Ferminionen: halbzahlig (Elektron: s=1/2). Bosonen: ganzzahlig.		
Magn. Spinquantenzahl	$m_s = \frac{S_z}{\hbar} = \{-s, \ldots, +s\}$ $\Rightarrow m_s^e = \pm 1/2$	Spin up:	$\left\lvert s = \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}\right\rangle = \lvert + \rangle = \lvert \uparrow \rangle = \lvert 0 \rangle$	Spin down	$\left\lvert s = \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\right\rangle = \lvert - \rangle = \lvert \downarrow \rangle = \lvert 1 \rangle$		
Eigenzust. $\hat{S}_z$:	$\hat{S}_z\lvert\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}\lvert\uparrow\rangle;\ \hat{S}_z\lvert\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}\lvert\uparrow\rangle$	Eigenzustand $\hat{S}^2$	$\hat{S}^2\lvert\uparrow\rangle = s(s+1)\hbar^2\lvert\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\lvert\uparrow\rangle;\ \hat{S}^2\lvert\downarrow\rangle = s(s+1)\hbar^2\lvert\downarrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\lvert\downarrow\rangle$				
Kommutator:	$[S_i, S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k$	kompatibel zu $\hat{S}_i$:	$\hat{H}, \hat{L}_i, \hat{L}^2, \hat{S}^2$	kompatibel zu $\hat{S}^2$:	$\hat{H}, \hat{L}_i, \hat{L}^2, \hat{S}_i$		
Produktraum:	$\lvert\psi\rangle = \lvert\psi_{nlm}\rangle \otimes \lvert\psi_s\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_{nlm} \otimes \mathcal{H}_s$	$\langle\psi\vert\psi'\rangle = (\langle\psi_{nlm}\rvert \otimes \langle\psi_s\rvert) \cdot (\lvert\psi'_{nlm}\rangle \otimes \lvert\psi'_s\rangle) = \langle\psi_{nlm}\vert\psi'_{nlm}\rangle \cdot \langle\psi_s\vert\psi'_s\rangle$					
	$\dim(\mathcal{H}) = \dim(\mathcal{H}_{nlm})\dim(\mathcal{H}_s) = (2l+1)(2s+1) = (2l+1)\cdot 2$	Operator $\hat{S}^2$:	$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^{\ 2} + \hat{S}_y^{\ 2} + \hat{S}_z^{\ 2}$				
Spinor:	$\lvert\psi_s\rangle = \alpha\lvert\uparrow\rangle + \beta\lvert\downarrow\rangle \Rightarrow \lvert\psi_s\rangle^{\{S_z\}} = \begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$ mit Basis $\{S_z\} = \{\lvert\uparrow\rangle, \lvert\downarrow\rangle\}$	Operatoren $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$	$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x;\ \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y;\ \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$				
Operator $\hat{S}_{\hat{n}}$	$\hat{S}_{\hat{n}} = \frac{\hbar}{2}(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z) = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x \sin\vartheta\cos\varphi + \sigma_y \sin\vartheta\sin\varphi + \sigma_z\cos\vartheta)$ mit $\lvert\hat{n}\rvert = 1;\ \hat{n} = (n_x, n_y, n_z)^T$						
Leiteroperatoren	$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$; nicht herm. $\hat{S}_+^\dagger = \hat{S}_-;\ \hat{S}_-^\dagger = \hat{S}_+$	$\hat{S}_\pm\lvert s m_s\rangle = \sqrt{(s \mp m_s)(s \pm m_s + 1)}\hbar\lvert s, m_s \pm 1\rangle$	$\hat{S}_+\lvert\downarrow\rangle = \lvert\uparrow\rangle;\ \hat{S}_-\lvert\uparrow\rangle = \lvert\downarrow\rangle$				
	$\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) \Rightarrow \hat{S}_x\lvert\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}\lvert\downarrow\rangle;\ \hat{S}_x\lvert\downarrow\rangle = \frac{\hbar}{2}\lvert\uparrow\rangle$	$\hat{S}_y = -i\frac{1}{2}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-) \Rightarrow \hat{S}_y\lvert\uparrow\rangle = \frac{i\hbar}{2}\lvert\downarrow\rangle;\ \hat{S}_y\lvert\downarrow\rangle = -\frac{i\hbar}{2}\lvert\uparrow\rangle$					
Paulimatritzen	$\sigma_x = \lvert\uparrow\rangle\langle\downarrow\rvert + \lvert\downarrow\rangle\langle\uparrow\rvert = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}^{\{S_z\}};\ \sigma_y = i(-\lvert\uparrow\rangle\langle\downarrow\rvert + \lvert\downarrow\rangle\langle\uparrow\rvert) = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}^{\{S_z\}};\ \sigma_z = \lvert\uparrow\rangle\langle\uparrow\rvert - \lvert\downarrow\rangle\langle\downarrow\rvert = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}^{\{S_z\}}$						
Spinrichtung:	$\vec{s} = \frac{2}{\hbar}\left\langle\psi\middle\vert\hat{\vec{S}}\middle\vert\psi\right\rangle$	Spin-Hamilton:	$\hat{H}_s = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}$	Larmorfrequenz:	$\omega_L = \gamma B = \frac{\lvert\mu_s\rvert}{\lvert\vec{S}\rvert}B = \frac{qB}{m}$	Bloch Vekt.	$\lvert\Psi\rangle = \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\lvert\uparrow\rangle + e^{i\varphi}\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\lvert\downarrow\rangle$
EV. in x,y-Richtung z. Basis z	$\lvert\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert\uparrow\rangle + \lvert\downarrow\rangle)$ $\lvert\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert\uparrow\rangle - \lvert\downarrow\rangle)$	$\lvert\uparrow_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert\uparrow\rangle + i\lvert\downarrow\rangle)$ $\lvert\downarrow_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert\uparrow\rangle - i\lvert\downarrow\rangle)$	Herleitung mit Bloch-Vektor. Z.B. $\lvert\uparrow_y\rangle \mathrel{\hat{=}} \left(\vartheta = \frac{\pi}{2}, \varphi = \frac{\pi}{2}\right) \Rightarrow$ $\lvert\uparrow_y\rangle = \cos\left(\frac{\pi}{4}\right)\lvert\uparrow\rangle + e^{i\frac{\pi}{2}}\sin\left(\frac{\pi}{4}\right)\lvert\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\lvert\uparrow\rangle + i\frac{1}{\sqrt{2}}\lvert\downarrow\rangle$				

Produktbasis, gekoppelte Basis

Produktbasis	Observable $\{L^2, L_z, S^2, S_z\}$ mit QZ $\lvert L, M; S, M_s\rangle$	Gekoppelte Basis:	Observable $\{L^2, S^2, J^2, J_z\}$ mit QZ $\lvert L, S, J, M_j\rangle$		
Gesamtdrehimp.	$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ $\quad [J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k$	Ges.drehimp.QZ:	$\lvert l - s\rvert \le J \le \lvert l + s\rvert$	magn. Gesamtdrehimp.-QZ	$M_j = \{-J, \ldots, J\}$
	$\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$ $\quad \vec{J}^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L}\vec{S}$				
Clebsch-Gordon	(1) Finde Tabelle passend zu $(j_1, j_2) \mathrel{\hat{=}} (s_1, s_2)$. (2) Finde rechts oben die Spalte mit den zu transformierenden Werten für $(J, M_j) \mathrel{\hat{=}} (S, M_s)$. (3) Darunter stehen die Koeffizienten der Produktbasisvektoren (Wurzel hinzufügen) (4) Die passenden Werte m_1, m_2 für die Produktbasisvektoren $\lvert j_1 m_1\rangle \otimes \lvert j_2 m_2\rangle$ bzw. $\lvert s_1 m_1\rangle \otimes \lvert s_2 m_2\rangle$ stehen links.				

Schrödingergleichung für Wasserstoffatom und wasserstoffartige Atome

absolut Koord:	$\left(\frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\hat{P}_N^2}{2M_N} - \frac{Ze^2}{\lvert\vec{r}_e - \vec{r}_N\rvert}\right)\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_N) = E\,\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_N)$	Relativkoord.	$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_N$	Relativimpuls:	$\vec{p} = \frac{M_N\vec{p}_e - m_e\vec{P}_N}{M_{ges}}$	Gesamtmasse:	$M_{ges} = m_e + M_N$		
SP-Koord:	$\left(\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{\hat{P}^2}{2M_{ges}} - \frac{Ze^2}{r}\right)\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\,\Psi(\vec{r}, \vec{R})$	SP-koord:	$\vec{R} = \frac{\vec{r}_e m_e + \vec{r}_N M_N}{M_{ges}}$	Gesamtimpuls:	$\vec{P} = \vec{p}_e + \vec{P}_N$	Reduz. Masse:	$\mu = \frac{m_e M_N}{M_{ges}}$		
relativkoord.	$\Psi = \phi(\vec{r})\,e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} \Rightarrow \left(\frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}\right)\phi(\vec{r}) = \varepsilon\,\phi(\vec{r})$	Energ Rel.bew.	$\varepsilon = E - E_{kin}^{SP}$	Kin. Energ. des SP:	$E_{kin}^{SP} = \frac{\hbar\vec{K}^2}{2M_{ges}}$	Kin. Energie Relativbew.:	$\frac{\hat{p}^2}{2\mu}$	Kernpot:	$-\frac{Ze^2}{r}$

3D Schrödingergl.: $\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2 + V(r)\right)\phi(\vec{r}) = \varepsilon\,\phi(\vec{r})$ Coulomb-Pot.: $V(r) = -\frac{e^2 Z}{r} \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2 - \frac{e^2 Z}{r}\right)\phi(\vec{r}) = \varepsilon\,\phi(\vec{r}) \Rightarrow$

$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}^2(\vartheta,\varphi)}{2\mu r^2} - \frac{e^2 Z}{r}\right)\phi(\vec{r}) = \varepsilon\,\phi(\vec{r})\ \Big\vert\ \hat{L}^2\Psi = \hbar^2 l(l+1)\Psi \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2 Z}{r}\right)\phi(\vec{r}) = \varepsilon\,\phi(\vec{r})$

Produktansatz: $\phi(\vec{r}) = R(r)\,Y_l^m(\vartheta, \varphi) \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2 Z}{r}}_{\text{effektives Pot.}}\right)R(r) = \varepsilon\,R(r)$ mit $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$ ... Zentrifugalpotential

Transformation zu Sturm-Liouville EW-Problem: $R(r) \to \frac{u(r)}{r}$ mit Dirichlet Randbedingungen $u(0) = 0, \lim_{r\to\infty} u(r) = 0 \Rightarrow$

$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{ar} + \frac{k^2}{2}\right)u(r) = 0$ mit $k^2 = \frac{2\mu\lvert E\rvert}{\hbar^2}$ und $a = \frac{a_0}{Z}$ und $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ Lösung mit Frobenius-Methode $u(r) = e^{-kr}r^{\alpha+1}\sum_{i=0}^{\infty} a_i r^i$

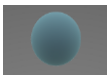
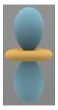
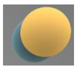
Lösung	$\phi_{nlm}(\vec{r}) = \phi_{nl}(r)\,Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \frac{2}{n^2}\sqrt{\left(\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!a^3}\right)}\left(\frac{2r}{an}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{an}\right)e^{-\frac{r}{na}}\,Y_l^m(\vartheta, \varphi)$	Atomradius	$a = \frac{a_0}{Z}$	Bohr Radius:	$a_0^{cgs} = \frac{\hbar^2}{\mu e^2};\ a_0^{SI} = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$		
Eigenenerg.:	Geb. Zust: $\varepsilon < 0;\ E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\frac{1}{n^2} = -Z^2 R_\mu \frac{1}{n^2}$	Rydberg konst.:	$R_\mu^{cgs} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2};\ R_\mu^{SI} = \frac{\mu e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}$	$E_n - E_m = Z^2\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$			
Paritätstrafo:	$\vec{r} \to -\vec{r} \Leftrightarrow r \to r;\ \vartheta \to \pi - \vartheta;\ \varphi \to \varphi + \pi$	Paritätsoperator:	$\hat{\Pi}\lvert nlm\rangle = (-1)^l\lvert nlm\rangle$				

Kommutatoralgebra

Kommutator:	$[AB] = AB - BA$	Antikommutator:	$\{AB\} = [AB]_+ = AB + BA$	Vertauschen von Operatoren:	$AB = [AB] + BA$
Rechenregeln:	$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}];\ [\hat{A}, \hat{A}] = 0;\ [\hat{A}, \beta\hat{B}] = \beta[\hat{A}, \hat{B}];\ [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}];\ [\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$				
	$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}];\ [\hat{A}, \hat{B}^n] = \sum_{\alpha=1}^{n}\hat{B}^{\alpha-1}[\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^{n-\alpha};\ [\hat{A}, 1] = [1, \hat{A}] = 0\ \ \forall[\hat{A}, \hat{B}] = c \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}^n] = nc\hat{B}^{n-1}$				
Hermitesch	Falls $[\hat{A}, \hat{B}]$ hermitesch (EW reel), dann ist $[\hat{A}, \hat{B}]_+$ antihermitesch (EW imaginär) und umgekehrt.				

Diverses

$\cos(\underline{z}) = \cosh(i\underline{z}) = \frac{e^{i\underline{z}}+e^{-i\underline{z}}}{2}$	$\sin(\underline{z}) = -i\sinh(i\underline{z}) = \frac{e^{i\underline{z}}-e^{-i\underline{z}}}{2i}$	$\cosh(\underline{z}) = \cos(i\underline{z}) = \frac{e^{\underline{z}}+e^{-\underline{z}}}{2}$	$\sinh(\underline{z}) = -i\sin(i\underline{z}) = \frac{e^{\underline{z}}-e^{-\underline{z}}}{2}$
$\tan(\underline{z}) = -i\tanh(i\underline{z}) = \frac{e^{i\underline{z}}-e^{-i\underline{z}}}{i(e^{i\underline{z}}+e^{-i\underline{z}})}$	$\cot(\underline{z}) = i\coth(i\underline{z}) = \frac{i(e^{i\underline{z}}+e^{-i\underline{z}})}{e^{i\underline{z}}-e^{-i\underline{z}}}$	$\tanh(\underline{z}) = -i\tan(i\underline{z}) = \frac{e^{\underline{z}}-e^{-\underline{z}}}{e^{\underline{z}}+e^{-\underline{z}}} = \frac{e^{2\underline{z}}-1}{e^{2\underline{z}}+1}$	$\coth(\underline{z}) = \frac{e^{\underline{z}}+e^{-\underline{z}}}{e^{\underline{z}}-e^{-\underline{z}}}$
$Ae^{ix}+Be^{-ix} = (A+B)\cos(x)+i(A-B)\sin(x)$		$Ae^{x}+Be^{-x} = (A+B)\cosh(x)+(A-B)\sinh(x)$	

Hermitesche Polynome	$\mathrm{H}_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}$; orthogonal bzgl. Gewichtsfunktion e^{-x^2}: $\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{H}_n(x)\,\mathrm{H}_m(x)\,e^{-x^2} = \delta_{nm}$ $\mathrm{H}_0(x) = 1;\ \mathrm{H}_1(x) = 2x;\ \mathrm{H}_2(x) = 4x^2-2;\ \mathrm{H}_3(x) = 8x^3-12x;\ \mathrm{H}_4(x) = 16x^4-48x^2+12;\ \ldots$
Zugeord. Laguerre-Polynome	$L_\beta^\alpha(x) = \sum_{m=0}^{\beta}(-1)^m\frac{(\alpha+\beta)!}{(\beta-m)!(\alpha+m)!m!}x^m$; $L_0^k(x) = 1;\ L_1^k(x) = -x+k+1;\ L_2^k(x) = \frac{1}{2}(x^2-2(k+2)x+(k+1)(k+2))$
Kugelflächenfunktion	$Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\mathrm{P}_l^m(\cos\vartheta)\,e^{im\varphi}$; $Y_{l,m}^* = (-1)^m Y_{l,-m};\ Y_{l,m}(\pi-\vartheta,\pi+\varphi) = (-1)^l\,Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)$ $Y_{0,0}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}};\ Y_{1,-1}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin(\vartheta)\,e^{-i\varphi};\ Y_{1,0}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\vartheta);\ Y_{1,1}(\vartheta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin(\vartheta)\,e^{i\varphi}$ $Y_{2,0}(\vartheta,\varphi) = -\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2(\vartheta)-1)$; $Y_{l,0}(0,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}};\ Y_{l,m}(0,\varphi)_{\vert m\neq 0} = Y_{l,m}(\pi,\varphi)_{\vert m\neq 0} = 0;\ Y_{l,0}(\pi,\varphi) = (-1)^l\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$ l=0 m=0  ; l=1 m=0  ; l=2 m=0  ; l=3 m=0  ; l=1 m=-1  ; l=1 m=1  ; …

Herleitung Schrödingergleichung

Herleitung gemäß Skriptum:

Allgemeine Wellengleichung:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi(x,t) \xRightarrow{allg.\ Lsg.} \Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -i\omega Ae^{i(kx-\omega t)} = -i\omega A\,\Psi(x,t)\ \Big|\cdot i\hbar \Rightarrow$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \hbar\omega\cdot Ae^{i(kx-\omega t)}\ \Big|\ \hbar\omega = E,\ Ae^{i(kx-\omega t)} = \Psi(x,t) \Rightarrow$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = E\,\Psi(x,t)\ \ldots(1)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = -k^2\cdot Ae^{i(kx-\omega t)} = -k^2\,\Psi(x,t)\ \Big|\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{i}\right)^2 \Rightarrow$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{i}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{i}\right)^2 k^2\,\Psi(x,t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = +\frac{\hbar^2k^2}{2m}\Psi(x,t)\ \Big|\ \hbar^2k^2 = p^2 \Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = +\frac{p^2}{2m}\Psi(x,t)\ \ldots(2)\ \Big|\ E = E_{kin} = \frac{mv^2}{2} = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = E\,\Psi(x,t)\ \ldots(3)$$

$$E\,\Psi(x,t) = E\,\Psi(x,t) \xRightarrow{(1),(3)}$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)} \xRightarrow{(1)}$$

$$\boxed{E\,\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)}$$

Hamilton:

$$E = \mathrm{H}(x,p)\ \big|\cdot\Psi(x,t) \Rightarrow$$

$$E\,\Psi(x,t) = \mathrm{H}(x,p)\,\Psi(x,t)\ \Big|\ \mathrm{H}(x,p) = \frac{p^2}{2m}+\mathrm{V}(x) \Rightarrow$$

$$E\,\Psi(x,t) = \frac{p^2}{2m}\Psi(x,t) + E_{kin}\,\Psi(x,t) =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)\,\Psi(x,t) \xRightarrow{(2)}$$

$$\boxed{E\,\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\mathrm{V}(x)\right)\Psi(x,t)} \xRightarrow{(1)}$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\mathrm{V}(x)\right)\Psi(x,t)}$$

Eigene Herleitung (kürzer, kein „Guesswork")

Allgemeine Wellengleichung:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi(x,t) \xRightarrow{allg.\ Lsg.} \Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = -k^2\cdot Ae^{i(kx-\omega t)} = -k^2\,\Psi(x,t)\ \Big|\ k^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \Rightarrow$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi(x,t)\ \Big|\ E_{kin} = \frac{mv^2}{2} = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p^2 = 2mE_{kin} \Rightarrow$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = -\frac{2m}{\hbar^2}E_{kin}\,\Psi(x,t)\ \Big|\cdot\frac{-\hbar^2}{2m} \Rightarrow$$

$$\boxed{E_{kin}\,\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)}\ \Big|\ E_{kin} = E - E_{pot} = E - \mathrm{V}(x) \Rightarrow$$

$$E\,\Psi(x,t) - \mathrm{V}(x)\,\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)$$

$$E\,\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + \mathrm{V}(x)\,\Psi(x,t)$$

$$\boxed{E\,\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\mathrm{V}(x)\right)\Psi(x,t)}\ \ldots(4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -i\omega\,\Psi(x,t)\ \Big|\ \hbar\omega = E \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar} \Rightarrow$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{i}{\hbar}E\,\Psi(x,t) \Rightarrow E = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow$$

$$E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \xRightarrow{(4)}$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\mathrm{V}(x)\right)\Psi(x,t)}$$

Delta- und Heaviside-Funktion

Delta-Funktion	$\delta(x) \leftrightarrow \delta[\varphi] = \delta_0[\varphi] = \varphi(0) \leftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,\varphi(x)\,dx = \varphi(0)$; $\delta(x-x_0)\,\delta_{x_0}[\varphi] = \varphi(x_0)$ $\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,dx = 1$; $\int_a^b\delta(x)\,dx = \begin{cases}1, für\ 0\in[a,b]\\0, sonst\end{cases}$; $\delta(x) = \frac{d}{dx}\mathrm{H}(x)$; $\mathrm{f}(x)\,\delta(x-x_0) = \mathrm{f}(x_0)\,\delta(x-x_0)$; $\delta(x) = \delta(-x)$ $x\,\delta(x) = 0$; $\delta(ax) = \frac{1}{\vert a\vert}\delta(x)$; $\vert x\vert\,\delta(x^2) = \delta(x)$; $\delta(\mathrm{f}(x)) = \sum_{x_i}\frac{\delta(x-x_i)}{\vert\mathrm{f}'(x_i)\vert};\ x_i\ \ldots\ \underline{einfache}\ NST$; $\int\delta(x)\,dx = \mathrm{H}(x)$
Heaviside-Funktion	$\mathrm{H}(x) \leftrightarrow \mathrm{H}[\varphi] = \int_0^{\infty}\varphi(x)\,dx;\ \mathrm{H}(x-x_0) = \int_{-\infty}^{x-x_0}\delta(t)\,dt;\ \mathrm{H}(x) = \begin{cases}1\ für\ x>0\\\frac{1}{2}\ für\ x=0\\0\ sonst\end{cases}$

Quadratische n_xn-Matrizen

Determi-nante:	$\det\begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix} = a_1 b_2 - b_1 a_2$	$\det\begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = \vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c}) = \begin{matrix} a_1 b_2 c_3 + \\ b_1 c_2 a_3 + \\ c_1 a_2 b_3 - \\ c_1 b_2 a_3 - \\ c_2 b_3 a_1 - \\ c_3 b_1 a_2 \end{matrix} = \begin{matrix} a_1(-1)^{1+1}\begin{vmatrix} b_2 & c_2 \\ b_3 & c_3 \end{vmatrix} + \\ b_1(-1)^{1+2}\begin{vmatrix} a_2 & c_2 \\ a_3 & c_3 \end{vmatrix} + \\ c_1(-1)^{1+3}\begin{vmatrix} a_2 & b_2 \\ a_3 & b_3 \end{vmatrix} \end{matrix} = \varepsilon_{ijk} a_i b_j c_k$		
invertierbar:	$\exists B: AB = \mathbb{1} \Leftrightarrow regulär$	Invertieren: $[A\mid\mathbb{1}] \xrightarrow{Gauss} [\mathbb{1}\mid A^{-1}]$	Invertieren 2x2: $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad-bc}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$	
Rechen-regeln:	$\det(AB) = \det(A)\det(B)$	$\det(A^T) = \det(A)$	$\det(A^{-1}) = \det(A)^{-1}$	$\det(sA) = s^n \det(A)$
selbstadjung.	in $\mathbb{R}^{nxn}$: selbstadjungiert≡symetrisch (s.u.) $\langle A\vec{x},\vec{y}\rangle = \langle\vec{x},A\vec{y}\rangle$	in $\mathbb{C}^{nxn}$: selbstadjungiert≡hermit (s.u.) $\langle A\vec{x}\vert\vec{y}\rangle = \langle\vec{x}\vert A\vec{y}\rangle$		
hermit:	$A = A^\dagger = A^* \Leftrightarrow EV\ bilden\ OGB\ D \Leftrightarrow \exists: OGB\ D: U^\dagger A\, U = D$	herm.$\Longrightarrow \forall\lambda_i \in \mathbb{R}$; h.$\Longrightarrow$diag.bar; h.$\Longrightarrow$selbstadj.; h.$\Longrightarrow$ normal		
unitär:	$A \in \mathbb{C}^{nxn}: U^\dagger = U^{-1} \Leftrightarrow U\, U^\dagger = \mathbb{1} \Leftrightarrow \Vert\vec{x}\Vert = \Vert U\vec{x}\Vert$	unitär $\Longrightarrow \det(U) = 1$; unit. $\Longrightarrow \forall\lambda_i = e^{it_i}$, unit. $\Longrightarrow$ diag.bar; unit. $\Longrightarrow$ normal		
diag.sierbar:	$\exists T: T\,A\,T^{-1} = D \Leftrightarrow \exists\ Eigenbasis\ D: A = X\,D\,X^{-1} \forall\lambda_i: algebr. Vielfachheit\ n = geom. Vielfachheit\ g \Leftrightarrow AB = BA$			
normal:	A ist normal, wenn $[AA^*] = AA^* - A^*A = \mathbb{0}$.			
orthogonal:	$A \in \mathbb{R}^{nxn}: A^T = A^{-1} \Leftrightarrow A\,A^T = \mathbb{1} \Leftrightarrow \Vert\vec{x}\Vert = \Vert A\vec{x}\Vert$	orthogonal $\Longrightarrow \det(A) = \pm 1$; orthognal $\Longrightarrow \forall\lambda_i = \pm 1$		
EW λ, EV $\vec{v}$	$A\vec{v} = \lambda\vec{v};\ Eigenvektor\ \vec{v} \in \mathbb{C}^n \backslash \{\vec{0}\}; Eigenwert\ \lambda \in \mathbb{C}. Wenn\ A \in \mathbb{R}^{nxn} \wedge pos. definit \Longrightarrow \forall\lambda_i \in \mathbb{R} \wedge \forall\lambda_i > 0.$ Berechnung EW: $A\vec{v} = \lambda\vec{v} \Longrightarrow A\vec{v} = \lambda\mathbb{1}\vec{v} \Longrightarrow A\vec{v} - \lambda\mathbb{1}\vec{v} = 0 \Longrightarrow$			
EW und EV	EW: $\mathrm{p}(\lambda) = \det(A - \lambda\mathbb{1}) = 0$; EV: $\vec{v}_{1\dots n} \in \mathrm{Eigenraum}(\lambda_i) = \mathrm{Kern}(A - \lambda_i\mathbb{1})$			

Hilbertraum

Hilbertraum $\mathcal{H}$. Allgemein	Ein Hilbertraum H ist ein bezüglich der vom Skalarprodukt induzierten Metrik vollständiger Prähilbertraum $(\bar{V},\langle\cdot,\cdot\rangle)$. Das heißt jede Cauchy-Folge konvergiert gegen ein Element im Raum.	
Prähilbertraum	Ein Vektorraum, in dem ein inneres Produkt definiert ist $(V,\langle\cdot,\cdot\rangle)$, heißt *Prähilbertraum*. Damit es ein inneres Produkt $\langle\cdot,\cdot\rangle$ geben kann, muss im Raum eine geeignete Norm definiert sein (nämlich eine Norm, die die Parallelogrammgleichung erfüllt; z.B. $\Vert\cdot\Vert_2$), bzw. das Innere Produkt *induziert* die Norm: $\Vert x\Vert_2 = \sqrt{\langle x,x\rangle}\ \ \forall x \in V$. In einem Prähilbertraum ist „*Orthogonalität*" x⊥y definiert ($x \perp y \Leftrightarrow \langle x,y\rangle = 0$), und es existieren *Orthonormalbasen*.	
Norm. Vektor-raum (V, ‖ · ‖):	Vektorraum mit definierter Norm	$V \to \mathbb{R}_0^+: \vec{x} \to \Vert\vec{x}\Vert: (\Vert s\vec{x}\Vert = \vert s\vert\Vert\vec{x}\Vert) \wedge (\Vert\vec{x}+\vec{y}\Vert \le \Vert\vec{x}\Vert + \Vert\vec{y}\Vert) \wedge (\Vert\vec{x}\Vert \ge 0;\ \ \Vert\vec{x}\Vert = 0 \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{0})$
Vektorraum, allgemein	Es seien V eine Menge, $(\mathbb{K},+,\cdot)$ ein Körper, $\oplus$: $V \times V \to V$ die Vektoraddition und $\odot$: $\mathbb{K} \times V \to V$ die Skalar-multiplikation. Dann ist $(V,\oplus,\odot)$ ein Vektorraum über den Körper $\mathbb{K}$, wenn für die Vektoraddition gilt: V1: $u\oplus(v\oplus w) = (u\oplus v)\oplus w$ (Assoziativgesetz) V2: $\exists 0 \in V: V\oplus 0 = 0\oplus V$ (neutrales Element 0) V3: $\exists(-v) \in V: V\oplus(-v) = (-v)\oplus V = 0$ (inverses Element) V4: $v\oplus u = u\oplus v$ (Kommutativgesetz) und wenn für die Vektormultiplikation gilt: S1: $\alpha\odot(u\oplus v) = (\alpha\odot u)\oplus(\alpha\odot v)$ S2: $(\alpha+\beta)\odot v = (\alpha\odot v)\oplus(\beta\odot v)$ S3: $(\alpha\cdot\beta)\odot v = \alpha\odot(\beta\odot v)$ S4: $\exists 1 \in \mathbb{K}: 1\odot v = v$ (neutrales Element 1) für alle $u,v,w \in V$ und $\alpha,\beta \in \mathbb{K}$. V1, V2, V3 besagt, dass $(V,\oplus)$ eine Gruppe bildet, und V4, dass diese abelsch ist.	

Modellpotentiale (1D)

Unendlich hoher Potentialtopf von x = 0 bis a	$\Psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ mit $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ ... (1) Rand bed.: $\Psi(0) = 0 \Longrightarrow B = -A$ ... (2); $\Psi(a) = 0 \overset{(2)}{\Rightarrow} k = \frac{n\pi}{a}$ ... (3) Lösung: $\Psi = C\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ mit $C = \sqrt{2/a}$ $E = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \overset{(3)}{\Longrightarrow}$ $E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}n^2 = E_1 n^2$
Potentialstufe $V(x \leq 0) = 0$ $V(x > 0) = V_0$ mit $E < V_0$	$\Psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ mit $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ ... (1) $\Psi_{II} = De^{-\kappa x}$ mit $\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ ... (2) Anschluss-bedingungen: $\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \Longrightarrow A + B = D$ ... (3); $\Psi_I'(0) = \Psi_{II}'(0) \Longrightarrow i\frac{k}{\kappa}A - i\frac{k}{\kappa}B = -D$ ... (4) $(3) + (4) \Longrightarrow B = -A\frac{\kappa+ik}{\kappa-ik}$ $\overset{(3)}{\Rightarrow} D = A\frac{2ik}{ik-\kappa}$ $\Psi_I = A\left(e^{ikx} - \frac{\kappa+ik}{\kappa-ik}e^{-ikx}\right)$; $\Psi_{II} = A\frac{2ik}{ik-\kappa}e^{-\kappa x}$ Refl.-koeff: $R = \frac{\lvert B\rvert^2}{\lvert A\rvert^2} = 1$ Ein-dring-tiefe: $\frac{\Psi_{II}(\delta)}{\Psi_{II}(0)} \overset{!}{=} \frac{1}{e} \Longrightarrow \delta = \frac{1}{2\kappa}$ Wahrsch strom dichte: $j_{in} = \frac{\hbar k}{m}$; $j_{refl} = \frac{\hbar k}{m}$
Potentialstufe $V(x \leq 0) = 0$ $V(x > 0) = V_0$ mit $E > V_0$	$\Psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ mit ... (1) $\Psi_{II} = Ce^{ik'x}$ mit $k' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$ ... (2) Anschluss-bedingungen: $\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \Longrightarrow A + B = C$ ... (3); $\Psi_I'(0) = \Psi_{II}'(0) \Longrightarrow \frac{k}{k'}A - \frac{k}{k'}B = C$ ... (4) $(3) - (4) \Longrightarrow B = A\frac{k-k'}{k+k'}$ $\overset{(3)}{\Rightarrow} C = A\frac{2k}{k+k'}$ Lösung: $\Psi_I = A\left(e^{ikx} + \frac{k-k'}{k+k'}e^{-ikx}\right)$; $\Psi_{II} = A\frac{2k}{k+k'}e^{-\kappa x}$ Refl.-koeff: $R = \frac{\lvert B\rvert^2}{\lvert A\rvert^2} = \left\lvert\frac{k-k'}{k+k'}\right\rvert^2$; $T = \frac{4kk'}{(k+k')^2}$ vgl. Optik: $R = \left\lvert\frac{n_1-n_2}{n_1+n_2}\right\rvert^2$
Wahrscheinlich-keitsstromdichte	$\mathrm{j}[\Psi] = \mathrm{Re}\left(\Psi^*\frac{1}{m}\hat{p}\Psi\right) = \mathrm{Re}\left(\Psi^*\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi\right)$; $j_{in} = \mathrm{j}[Ae^{ikx}]$; $j_{refl} = \mathrm{j}[Be^{-ikx}]$; $j_{out} = \mathrm{j}[Ce^{ik'x}]$ $j_I = \mathrm{j}[Ae^{\lambda_I kx} + Be^{-\lambda_I kx}] = \frac{\hbar k_1}{m}(\lvert A\rvert^2 - \lvert B\rvert^2)$; $j_{II} = \mathrm{j}[Ce^{\lambda_{II}k'x} + De^{-\lambda_{II}k'x}] = \frac{\hbar k_2}{m}(\lvert C\rvert^2 - \lvert D\rvert^2)$ Kontinuitätsbedingung $\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x} \Longrightarrow j = \rho v$
Potentialbarriere $V(0<x<a)=V_0$ sonst $V = 0$ mit $E < V_0$	$\Psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ $\Psi_{II} = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$ $\Psi_{III} = Ee^{ikx}$ mit $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; $\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ AB: $\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \Longrightarrow A + B = C + D$ $\Psi_I'(0) = \Psi_{II}'(0) \Longrightarrow ik(A - B) = \kappa(C - D)$ $\Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a) \Longrightarrow Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a} = Ee^{ika}$ $\Psi_{II}'(a) = \Psi_{III}'(a) \Longrightarrow \kappa Ce^{\kappa a} - \kappa De^{-\kappa a} = ikEe^{ika}$ $T = \frac{1-\frac{E}{V_0}}{1-\frac{E}{V_0}+\frac{V_0}{4E}\sinh^2(\kappa a)}$
Potentialbarriere $V(0<x<a)=V_0$ sonst $V = 0$ mit $E > V_0$	$\Psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ $\Psi_{II} = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}$ $\Psi_{III} = Ee^{ikx}$ mit $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; $k' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$ AB: $\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \Longrightarrow A + B = C + D$ $\Psi_I'(0) = \Psi_{II}'(0) \Longrightarrow ik(A - B) = ik'(C - D)$ $\Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a) \Longrightarrow Ce^{ik'a} + De^{-ik'a} = Ee^{ika}$ $\Psi_{II}'(a) = \Psi_{III}'(a) \Longrightarrow ik'Ce^{ik'a} - ik'De^{-ik'a} = ikEe^{ika}$ $T = \frac{\frac{E}{V_0}-1}{\frac{E}{V_0}-1+\frac{V_0}{4E}\sin^2(ka)}$
Harmonischer Oszillator	$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \Longrightarrow E\,\Psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\Psi(x) \Longrightarrow E\,\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)\right) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\,\Psi(x)$ ... (1) reduzierte Einheiten: $E = \hbar\omega\varepsilon$ ... (2a) $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ ... (2b) $x = yx_0$ ... (2c) $\Longrightarrow y = \frac{x}{x_0}$ ... (2d) $\Longrightarrow \frac{\partial y}{\partial x} = \frac{1}{x_0}$ ... (2e) $\Psi(x) \to \tilde{\Psi}(y) \overset{(1)}{\Rightarrow} E\,\tilde{\Psi}(y) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial\tilde{\Psi}}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\right)\frac{\partial y}{\partial x} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\,\tilde{\Psi}(y) \overset{(2e)}{\Longrightarrow}$ $E\,\tilde{\Psi}(y) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial\tilde{\Psi}}{\partial y}\frac{1}{x_0}\right)\frac{1}{x_0} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\,\tilde{\Psi}(y) \Longrightarrow E\,\tilde{\Psi}(y) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{x_0^2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\tilde{\Psi}(y) \overset{(2b)}{\Longrightarrow}$ $E\,\tilde{\Psi}(y) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\tilde{\Psi}(y) = \left(-\frac{1}{2}\hbar\omega\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\tilde{\Psi}(y) \overset{(2c)}{\Longrightarrow} \overset{(2b)}{\Longrightarrow}$ $E\,\tilde{\Psi}(y) = \left(-\frac{1}{2}\hbar\omega\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2y^2\frac{\hbar}{m\omega}\right)\tilde{\Psi}(y) = \left(-\frac{1}{2}\hbar\omega\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}\hbar\omega y^2\right)\tilde{\Psi}(y) \overset{(2a)}{\Longrightarrow}$ $\hbar\omega\varepsilon\,\tilde{\Psi}(y) = \left(-\frac{1}{2}\hbar\omega\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}\hbar\omega y^2\right)\tilde{\Psi}(y) \Longrightarrow \boxed{\varepsilon\,\tilde{\Psi}(y) = \frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2\right)\tilde{\Psi}(y)}$ ... (3) Ansatz: $\tilde{\Psi} = e^{-\frac{y^2}{2}}\,\mathrm{h}(y)$ mit Potenzreihe $\mathrm{h}(y) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i y_i$. Spezialfall Grundzustand: $\mathrm{h}(y) = 1 \Longrightarrow \tilde{\Psi} = e^{-\frac{y^2}{2}}$ ... (4a) $\Longrightarrow$ $\frac{\partial\tilde{\Psi}}{\partial y} = -ye^{-\frac{y^2}{2}} \Longrightarrow \frac{\partial^2\tilde{\Psi}}{\partial y^2} = -e^{-\frac{y^2}{2}} + y^2e^{-\frac{y^2}{2}}$ ... (4b) $\overset{(3)}{\Rightarrow} \varepsilon_1 e^{-\frac{y^2}{2}} = \frac{1}{2}\left(e^{-\frac{y^2}{2}} \cancel{- y^2e^{-\frac{y^2}{2}} + y^2e^{-\frac{y^2}{2}}}\right) \Longrightarrow \varepsilon_1 = \frac{1}{2} \overset{(2a)}{\Longrightarrow} \frac{E_1}{\hbar\omega} = \frac{1}{2} \Longrightarrow$ $\varepsilon_1 = \frac{1}{2} \overset{(2a)}{\Longrightarrow} \boxed{E_1 = \frac{1}{2}\hbar\omega}$ Allgemein: $\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)}$ Eigenzustände: $\tilde{u}_n(y) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}2^n n!}}e^{-\frac{y^2}{2}}\,\mathrm{H}_n(y)$; $u_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\,\mathrm{H}_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$ mit $\mathrm{H}_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}$